



Universidade do Estado do Rio de Janeiro
Instituto Politécnico

Edson Pereira de Sousa

**Avaliação de mecanismos dispersivos em rios
através de problemas inversos**

Nova Friburgo
2009

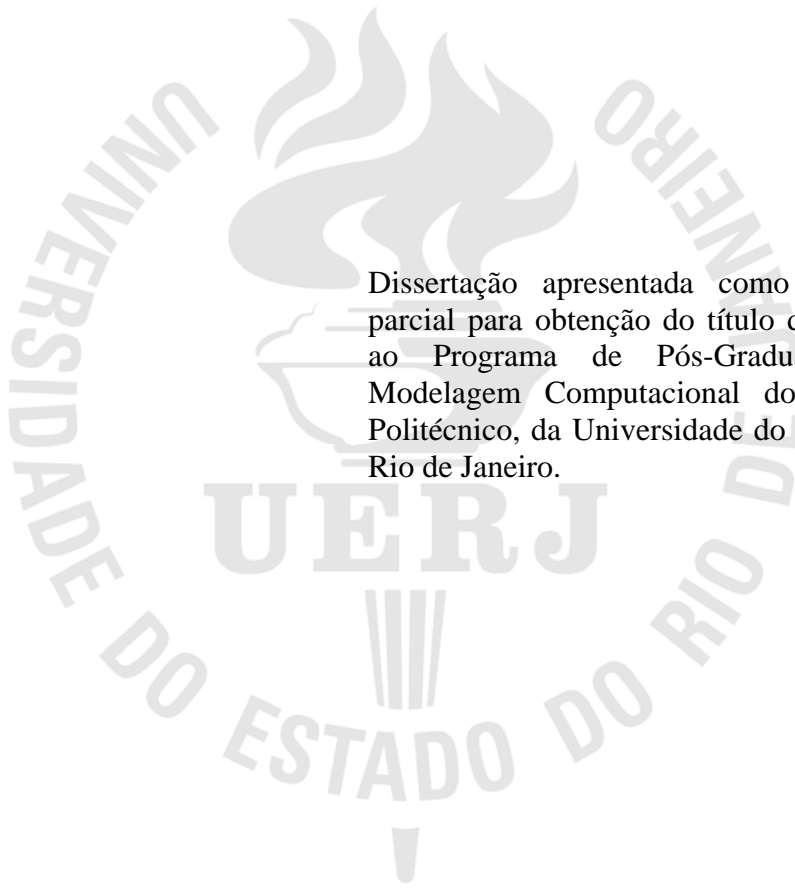
Livros Grátis

<http://www.livrosgratis.com.br>

Milhares de livros grátis para download.

Edson Pereira de Sousa

**Avaliação de mecanismos dispersivos em rios
através de problemas inversos**



Dissertação apresentada como requisito parcial para obtenção do título de Mestre, ao Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional do Instituto Politécnico, da Universidade do Estado do Rio de Janeiro.

Orientadores: Prof. Ph.D Francisco Duarte Moura Neto e
Prof. Ph.D Pedro Paulo Gomes Watts Rodrigues

Nova Friburgo
2009

CATALOGAÇÃO NA FONTE
UERJ / REDE SIRIUS / BIBLIOTECA CTC/E

S729

Souza, Edson Pereira de.

Avaliação de mecanismos dispersivos em rios através de problemas inversos / Edson Pereira de Souza. – 2009. 93 f.: il.

Orientadores: Francisco Duarte Moura Neto e Pedro Paulo Gomes Watts Rodrigues.

Dissertação (Mestrado) - Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Instituto Politécnico.

1. Água – Poluição – Métodos de simulação – Teses.
2. Água – Controle de qualidade – Modelos matemáticos - Teses. 3. Problemas inversos (Equações diferenciais) – Teses. 4. Hidrodinâmica – Teses. I. Moura Neto, Francisco Duarte. II. Rodrigues, Pedro Paulo Gomes Watts. III. Universidade do Estado do Rio de Janeiro. Instituto Politécnico. IV. Título.

CDU 628.19:519.6

Autorizo, apenas para fins acadêmicos e científicos, a reprodução total ou parcial desta dissertação.

Assinatura

Data

Edson Pereira de Sousa

**Avaliação de mecanismos dispersivos em rios
através de problemas inversos**

Dissertação apresentada como requisito parcial para obtenção do título de Mestre, ao Programa de Pós - Graduação em Modelagem Computacional do Instituto Politécnico, da Universidade do Estado do Rio de Janeiro. Área de concentração:

Aprovada em de de

Banca examinadora:

Prof. Francisco Duarte Moura Neto, Ph.D. (Orientador)
Universidade do Estado do Rio de Janeiro. Instituto Politécnico

Prof. Pedro Paulo Gomes Watts Rodrigues, Ph.D. (Orientador)
Universidade do Estado do Rio de Janeiro. Instituto Politécnico

Prof. Marco van Hombeeck, D.Sc
Universidade do Estado do Rio de Janeiro. Instituto Politécnico

Aricelso Maia Limaverde Filho, Ph.D.
Membro externo

DEDICATÓRIA

A Deus pela vida; aos meus pais Inácio e Edite, o início de tudo; e aos meus irmãos Hélio e Edivânea, companheiros na caminhada.

AGRADECIMENTOS

Aos meus orientadores, Professor Ph.D Francisco Duarte Moura Neto e Professor Ph.D Pedro Paulo Gomes Watts Rodrigues pelo apoio e paciência que foram fundamentais na realização do presente trabalho, mas principalmente pela força nos momentos difíceis.

Ao CNPQ pelo auxílio financeiro instituído na forma de bolsa do Programa de Mestrado em Modelagem Computacional.

Aos membros da banca, pelas contribuições para o aprimoramento deste trabalho.

Aos professores do Mestrado em Modelagem Computacional do IPRJ-UERJ pelo ensino.

Aos meus colegas de curso, parceiros desta caminhada, em especial aos amigos Cleber, Rosilene, Thiago, Vagner, Viviany, Agnaldo, Julliany por compartilharem minhas conquistas e angústias.

Aos amigos Thiago e Jéferson que, prontamente, cooperaram no trabalho de campo.

Aos meus amigos de longa data, pelo companheirismo e incentivo sempre presentes nos momentos felizes e difíceis da minha vida.

Aos que aqui, por razões exclusas deixarei de citar, a certeza de que fazem parte.

A Deus, pois sem Ele nada seria possível.

RESUMO

SOUSA, Edson Pereira de. Avaliação de mecanismos dispersivos em rios através de problemas inversos. 2009. 93 f. Dissertação (Mestrado em Modelagem Computacional) – Instituto Politécnico, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Nova Friburgo, 2009.

Nesta dissertação é apresentada a avaliação da dispersão de contaminantes no Rio São Pedro, pequeno curso situado na Bacia Hidrográfica do Rio Macaé, centro-norte do Estado do Rio de Janeiro. Para tanto, utilizou-se uma abordagem que conjugou simulação e observação. A simulação compreendeu a modelagem do transporte de substância conservativa em um dado trecho desse rio. O modelo adotado utilizou a formulação unidimensional da equação de advecção-dispersão, que tem como parâmetro crítico o coeficiente de dispersão longitudinal. Paralelamente foi conduzido um experimento de campo, que constou da injeção instantânea de massa conhecida de sal nesse trecho do rio, tendo sido monitorada a concentração resultante em uma seção situada a jusante do ponto de lançamento. Códigos numéricos foram implementados para obter-se o melhor ajuste entre simulação e observação, ajuste esse obtido através da estimativa do coeficiente de dispersão.

Palavras-chave: Dispersão longitudinal; Hidrodinâmica; Modelo de qualidade de água; Problema inverso.

ABSTRACT

In this dissertation we performed an assessment of contaminant dispersion in a small river located at Macaé Watershed Basin. We adopted an approach that made use both of simulation and experiments. The simulation solved the one dimensional transport model for a conservative substance, on which the dispersion coefficient plays a critical role. The observation data was obtained in an experiment especially designed for this purpose. An instantaneous injection of a known quantity of mass of salt in a given position of the river was discharged and the resulting concentration was monitored in two downstream stations. Numerical codes were built in order to obtain a better fitting between simulation and observation.

keywords: dispersion longitudinal; hydrodynamics; Model of quality of water; inverse problem.

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1 - Representação de um trecho do rio para mostrar o efeito dos perfis horizontais dos campos de velocidade sobre a dispersão de um poluente (adaptado de JABBOUR, 2006)	19
Figura 2.2 Representação de um trecho do rio para mostrar o efeito de uma advecção diferenciada, provocada pela presença do perfil horizontal do campo de velocidade, sobre a dispersão de um poluente (adaptado de JABBOUR, 2006).	19
Figura 2.3 Representação de um trecho do rio para mostrar o efeito da difusão turbulenta, com a presença dos perfil horizontal dos campo de velocidade, sobre a dispersão de um poluente (adaptado de JABBOUR, 2006).	20
Figura 2.4 - Volume de controle de largura Δx	21
Figura 2.5 - Distribuição normal da concentração $C(x,t)$ versus distância para uma fonte instantânea em três tempos ($t_1 < t_2 < t_3$)	23
Figura 2.6 - Comportamento da concentração de um traçador ao longo do escoamento a jusante de uma injeção pontual e instantânea (modificado de KILPATRICK, 1993).	29
Figura 2.7 - Influência das previsões da Equação Advecção-Dispersão (EAD) sobre a variância e assimetria do perfil das concentrações em função do tempo e da distância (modificado de JABBOUR, 2006).	30
Figura 3.1 - Pontos de crista e instantes de máximo.	34
Figura 3.2 - Representação gráfica do ponto de crista.	35
Figura 3.3 - Instante de máxima concentração na posição x^* .	36
Figura 5.1 - Localização do Rio São Pedro.	50
Figura 5.2 - Esquema de uma seção transversal de um rio e a posição dos perfis verticais.	53
Figura 5.3 - Foto com a utilização do molinete na seção de injeção (SILVA, 2009).	53
Figura 5.4 - Vaso de Mariotte utilizado na determinação da vazão pelo método químico (SILVA, 2009).	54
Figura 5.5 - Condutivímetro usado no teste de campo.	57

Figura 5.6 - Gráficos da correlação entre condutividade e concentração.	59
Figura 5.7 - Vista parcial do trecho do rio São Pedro.	61
Figura 5.8 - Gráfico concentração <i>versus</i> tempo para as seções de amostragem.	62
Figura 6.1 - Esquema da seção transversal do rio (modificado de SILVA, 2009).	64
Figura 6.2 - Gráficos comparando as concentrações observadas e estimadas pela fórmula de Elder na segunda seção de amostragem.	66
Figura 6.3 - Gráficos comparando as concentrações observadas e estimadas pela fórmula de McQuivey & Keefer na segunda seção de amostragem.	67
Figura 6.4 - Gráficos comparando as concentrações observadas e estimadas pela fórmula de Fischer na segunda seção de amostragem.	67
Figura 6.5 - Gráficos comparando as concentrações observadas e estimadas pela fórmula de Liu na segunda seção de amostragem.	68
Figura 6.6 - Gráficos comparando as concentrações observadas e estimadas pela fórmula de Magazine na segunda seção de amostragem.	68
Figura 6.7 - Gráficos comparando as concentrações observadas e estimadas pela fórmula de Iwasa e Aya na segunda seção de amostragem.	69
Figura 6.8 - Gráficos comparando as concentrações observadas e estimadas pela fórmula de Seo e Cheong na segunda seção de amostragem.	69
Figura 6.9 - Gráficos comparando as concentrações observadas e estimadas pela fórmula de Koussis e Rodriguez na segunda seção de amostragem.	70
Figura 6.10 - Gráficos comparando as concentrações observadas e estimadas pela fórmula de Kashfipour e Falconer na segunda seção de amostragem.	70
Figura 6.11- Resultados em termos da variável transformada de Chatwin para a seção de monitoramento, e linhas de melhor ajuste conforme a Eq. (3.5).	71
Figura 6.12 - Comparação entre as curvas de concentração <i>versus</i> tempo para os valores observados e os obtidos pelo método de Chatwin.	72
Figura 6.13 - Concentração de pico <i>versus</i> $1/\sqrt{x_p}$.	73
Figura 6.14 - Concentração <i>versus</i> tempo para o método do pico de concentração.	74
Figura 6.15 - Curvas de resposta referentes às concentrações medidas e estimadas pelo algoritmo LM utilizando a vazão determinada pelo método químico.	75
Figura 6.16 - Curvas de respostas referentes às concentrações medidas e estimadas pelo algoritmo LM utilizando a vazão determinada pelo método das seções.	76
Figura 6.17 - Concentração <i>versus</i> tempo para o método de Chatwin utilizando a vazão determinada pelo método químico.	79
Figura 6.18 - Concentração <i>versus</i> tempo para o método de Chatwin utilizando a	

vazão determinada pelo método das seções.	79
Figura 6.19 - Concentração <i>versus</i> tempo para o método do pico utilizando a vazão determinada pelo método químico.	80
Figura 6.20 - Concentração <i>versus</i> tempo para o método do pico utilizando a vazão determinada pelo método seções.	80

LISTA DE TABELAS

Tabela 4.1 - Classificação dos problemas inversos.	44
Tabela 5.1 - Resultados da calibração.	58
Tabela 5.2 - Características da seção de injeção utilizada no planejamento do teste no Rio São Pedro.	62
Tabela 6.1 - Valores das medições na seção transversal do rio (SILVA, 2009)	64
Tabela 6.2 - Concentrações e vazões para o teste realizado no Rio São Pedro.	65
Tabela 6.3 - Valores do coeficiente E_L estimados pelas formulas empíricas.	66
Tabela 6.4 - Parâmetros determinados pelo algoritmo LM.	75
Tabela 6.5 - Valores de alguns parâmetros obtidos pelas fórmulas empíricas.	77
Tabela 6.6 - Parâmetros utilizados no método de Chatwin.	78
Tabela 6.7 - Parâmetros utilizados no método do pico de concentração.	79
Tabela 6.8 - Comparação entre os resultados das amostras de campo e os valores estimados pelos métodos experimentais utilizando as vazões dos métodos químico e das seções.	81
Tabela 6.9 - Comparação entre os resultados das amostras de campo e os valores estimados pelo método LM utilizando as vazões dos métodos químico e das seções.	82

LISTA DE SÍMBOLOS

A	área de seção transversal ao escoamento principal, L^2
A	área, L^2
A_e	área da seção de entrada de um elemento de volume de controle, L^2
A_c	área sob a curva de resposta do traçador na seção de montante, $ML^{-3}T$
A_s	área da seção de saída de um elemento de volume de controle, L^2
B	largura média do trecho de mistura, L
c	concentração, ML^{-3}
c'	flutuação turbulenta da concentração c em torno de c , ML^{-3}
\bar{c}	valor médio temporal da concentração, ML^{-3}
c''	desvio da concentração com relação ao seu valor médio espacial, ML^{-3}
C	valor médio da concentração na seção transversal ao escoamento, ML^{-3}
C_E	concentração do efluente, ML^{-3}
C_f	concentração resultante após a homogeneização na seção transversal, ML^{-3}
C_p	concentração de pico, ML^{-3}
C_R	concentração do rio antes do efluente, ML^{-3}
D_m	coeficiente de difusão molecular, L^2T^{-1}
E_L	coeficiente de dispersão longitudinal, L^2T^{-1}
$f(x)$	função densidade de probabilidade da variável aleatória x
F	número de Froude, adimensional
g	aceleração da gravidade, LT^{-2}
H	profundidade média do escoamento, L
J	fluxo de massa, MT^{-1}
J_a	fluxo advectivo
J_d	fluxo de massa difusivo, MT^{-1}
J_d	fluxo ou taxa de transporte difusivo, $ML^{-2}T^{-1}$
J_{de}	fluxo de massa difusivo na seção de entrada, MT^{-1}
J_{ds}	fluxo de massa difusivo na seção de saída, MT^{-1}
k	constante do modelo empregado por Chatwin, coeficiente proporcional à quantidade de material sendo transportado no escoamento, $L^{-3}MT^{1/2}$
L	comprimento advectivo ou comprimento de mistura completa, L
m	massa no elemento de volume, M
M	dimensão de massa
M	massa de traçador, M
M_{rec}	massa recuperada, M
M_{rec}^*	massa recuperada corrigida da Eq. (5.6), M
M_{rio}	massa trazida pelo rio, M
n	Índice das iterações no algoritmo de Levenberg-Marquardt
N	número de amostras
Q	vazão, L^3T^{-1}
Q_E	vazão do efluente, L^3T^{-1}
Q_R	vazão do rio antes do efluente, L^3T^{-1}
R_H	raio hidráulico, L
S	declividade média do canal, adimensional
t	tempo, T
t_c	tempo de crista
t_p	instante de tempo em que ocorre o máximo para um valor x fixo, T
t_m	tempo de monitoramento da curva de resposta, T

u	componente longitudinal instantânea da velocidade, LT^{-1}
u'	flutuação turbulenta da componente longitudinal da velocidade, LT^{-1}
u''	desvio da velocidade longitudinal com relação ao seu valor médio espacial, LT^{-1}
U^*	velocidade de atrito ou de cisalhamento, LT^{-1}
\bar{u}	média temporal da componente longitudinal da velocidade, LT^{-1}
U	valor médio da velocidade na seção transversal, LT^{-1}
x	coordenada longitudinal, L
x_p	posição correspondente ao valor de pico da concentração, L
Y_i	medida de concentração observada no tempo t_i , ML^{-3}
δ	delta de Dirac
Δt	intervalo de tempo, T
Δx	largura do volume de controle, L
τ	tempo, T
ξ	coordenada longitudinal de um referencial móvel, T
∂	Símbolo de derivada parcial
ε	constante utilizada no critério de parada do algoritmo de Levenberg-Marquardt
κ	constante utilizada no fator de amortecimento do algoritmo
λ	fator de amortecimento utilizado no algoritmo de Levenberg-Marquardt
ν	constante utilizada para o fator de amortecimento
σ_x	variância da distribuição longitudinal de concentração, L^2
$\sigma_x(t)$	variância espacial da concentração no tempo t, L^2
ν	constante utilizada para o fator de amortecimento
$\vec{\beta}$	vetor de estimativas usado no método de Levenberg-Marquardt
R	vetor dos resíduos calculado entre as N amostras e valores estimados
R_i	vetor de resíduo no tempo t_i
J	matriz jacobiana

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO.....	15
2 CONCEITOS BÁSICOS EM FENÔMENOS DE TRANSPORTE EM CURSOS D'ÁGUA.....	18
2.1 Conceitos básicos.....	18
2.2 A equação de advecção-difusão.....	20
2.2.1 <u>Difusão molecular</u>	20
2.2.2 <u>Advecção-difusão</u>	24
2.2.3 <u>Dispersão turbulenta longitudinal</u>	26
2.3 Estimativa do Comprimento para Mistura Completa	29
3 COEFICIENTE DE DISPERSÃO LONGITUDINAL.....	32
3.1 Determinação experimental do coeficiente de dispersão.....	32
3.1.1 <u>Método de Chatwin</u>	32
3.1.2 <u>Método baseado na concentração de pico</u>	37
3.2 Determinação através de fórmulas empíricas	38
3.2.1 <u>Fórmula de Elder</u>	38
3.2.2 <u>Fórmula de Mcquivey & Keefer</u>	39
3.2.3 <u>Fórmula de Fischer</u>	39
3.2.4 <u>Fórmula de Liu</u>	40
3.2.5 <u>Fórmula de Magazine</u>	40
3.2.6 <u>Fórmula de Iwasa e Aya</u>	41
3.2.7 <u>Fórmula de Seo e Cheong</u>	41
3.2.8 <u>Fórmula de Koussis e Rodriguez-Mirasol</u>	42
3.2.9 <u>Fórmula de Kasherfipour e Falconer</u>	42
4 O PROBLEMA INVERSO.....	44
4.1 Formulação do problema inverso.....	44
4.2 Solução do problema inverso: método de Levenberg-Marquardt.....	45
5 METODOLOGIA E DESCRIÇÃO DO EXPERIMENTO.....	49
5.1 Localização da área de estudo.....	49
5.2 Caracterização da área de estudo.....	49

5.3 A problemática da área de estudo.....	50
5.4 Materiais e métodos.....	51
5.4.1 <u>Introdução.....</u>	51
5.4.2 <u>Parâmetros físicos e hidrodinâmicos.....</u>	52
5.4.3 <u>Métodos de determinação da vazão.....</u>	52
5.4.3.1 Método das seções ou método do molinete.....	53
5.4.3.2 Método químico.....	54
5.4.4 <u>Considerações sobre o traçador.....</u>	55
5.4.5 <u>Método de injeção do traçador utilizado.....</u>	56
5.4.6 <u>Conduvívmetro.....</u>	56
5.4.7 <u>Calibração do condutívmetro.....</u>	57
5.4.8 <u>Concentrações conservativas.....</u>	59
5.5 Descrição do experimento.....	60
6 RESULTADOS E DISCUSSÃO.....	64
6.1 Determinação da vazão pelo método das seções.....	64
6.2 Determinação da vazão pelo método químico.....	64
6.3 Obtenção do coeficiente de dispersão pelas fórmulas empíricas.....	65
6.4 Obtenção do coeficiente de dispersão pelos métodos experimentais.....	71
6.4.1 <u>Calculo do coeficiente de dispersão pelo método de Chatwin.....</u>	71
6.4.2 <u>Cálculo do coeficiente de dispersão pelo método da concentração de pico.....</u>	72
6.5 Obtenção dos parâmetros da solução da equação de advecção-difusão através do algoritmo de Levenberg-Marquardt.....	74
6.6 Comparação das fórmulas empíricas.....	76
6.7 Utilização do parâmetros geométricos e hidrodinâmicos obtidos pelo LM nos métodos de determinação experimental.....	78
6.8 Comparação entre os valores obtidos pelo método de Levenberg-Marquardt.....	81
7 CONCLUSÕES.....	83
REFERÊNCIAS BIBLIOGRAFICAS.....	86
APÊNDICE.....	89

1 INTRODUÇÃO

O acelerado crescimento populacional e a urbanização sem planejamento adequado, têm resultado em algumas conseqüências desastrosas aos recursos naturais, bem como na qualidade da água.

No Brasil, a crescente preocupação da sociedade brasileira com o desenvolvimento sustentável tem levado à priorização do processo de elaboração e de implementação de Planos de Recursos Hídricos para dar suporte à gestão desses recursos nas principais bacias do País, bem como para o aperfeiçoamento das metodologias desse processo. A preocupação com a preservação dos recursos hídricos existentes está consagrada na Lei 9433/97, que veio disciplinar o uso das águas no país, e nas resoluções Conama 01/86 e 357/2005 que, respectivamente, criou e atualizou o sistema de classificação das águas de acordo com seu uso preponderante. Dentre os instrumentos de controle previstos em nossa legislação, destacam-se o monitoramento e o diagnóstico da qualidade dos recursos hídricos, em especial de rios e estuários. A utilização de modelos de qualidade de água em ambientes naturais é uma ferramenta de grande utilidade nesse particular contexto.

Atualmente a demanda de água retirada dos corpos d'água para fins de saneamento e consumo (vazão de retirada) no país é de 1.592 m³/s, sendo que cerca de 53% deste total (841 m³/s) é consumida, não retornando às bacias hidrográficas. Desse total, 40% é destinado à irrigação; 27% são destinados ao abastecimento urbano; 17% para indústria; 13% para consumo animal; 3% para abastecimento rural (ANA, 2007).

Uma das principais causas da poluição das águas é a matéria orgânica presente no esgoto, uma vez que, a solução mais comum adotada pelos órgãos responsáveis pelo saneamento básico, é o lançamento em rios, em sua maioria sem nenhum tratamento prévio, comprometendo a qualidade da água não apenas no local onde o esgoto é despejado, mas em toda a sua bacia hidrográfica.

Segundo a Pesquisa Nacional de Saneamento Básico (PNSB 2000), feito em parceria entre o Ministério das Cidades e o Instituto Brasileiro de Geografia e Estatística (IBGE), no Brasil, apenas 33,5% dos domicílios são atendidos por rede geral de esgoto, além de apresentar um quadro marcante de desigualdades regionais. O atendimento chega ao seu nível mais baixo na região Norte, onde apenas 2,4% dos domicílios são atendidos, seguidos da região Nordeste (14,7%), Centro-Oeste (28,1%) e Sul (28,1%). A região Sudeste apresenta o melhor atendimento, mesmo assim, cobre pouco mais da metade dos domicílios da região (53,0%). Somente a imposição de marcos regulatórios cada vez mais restritivos e a realização

de investimentos em estações de tratamento de esgoto permitirão melhorar gradualmente a qualidade dos corpos hídricos (DEVENS, 2008).

O presente trabalho busca oferecer subsídios à avaliação da qualidade da água de cursos d'água naturais da região de São Pedro da Serra localizado no município de Nova Friburgo, centro-norte fluminense, apoiando-se em modelagem numérica. A proposta aplica técnicas de campo com o uso de um traçador salino para se quantificar um importante parâmetro físico de qualidade da água, o coeficiente de dispersão longitudinal, que mede a maior ou menor facilidade encontrada pelo curso d'água natural para dispersar um poluente que em suas águas se dissolva. O coeficiente de dispersão da equação de advecção-difusão foi empiricamente estimado para um trecho do Rio São Pedro. Essa estimação foi feita através da comparação da distribuição de concentração observada e da distribuição da concentração prevista de uma substância conservativa.

O mecanismo de dispersão longitudinal é estudado formulando e resolvendo os problemas direto e inverso. O problema direto consiste em calcular a concentração de um contaminante em um tempo e em uma posição, considerando conhecidas as características do rio e a descarga do contaminante. O problema inverso consiste em estimar o coeficiente de dispersão longitudinal conhecendo-se as concentrações medidas numa posição e ao longo do tempo.

No segundo capítulo são apresentados alguns conceitos fundamentais necessários à compreensão dos fenômenos de transporte em rios apresentado neste estudo. Esta revisão contém a dedução da equação da advecção-difusão na sua forma unidimensional e a estimativa do comprimento advectivo para validade do modelo unidimensional

No terceiro capítulo é resolvido o problema direto apresentando duas metodologias para determinação do coeficiente de dispersão E_L , uma denominada de métodos experimentais que utilizam informações das curvas de resposta do traçador, e outra com fórmulas práticas com o uso de informações da geometria e dos parâmetros hidrodinâmicos medidos na seção de injeção do curso d'água.

No quarto capítulo é apresentado o problema inverso e proposto para sua solução a utilização do algoritmo de Levenberg-Marquardt (LM). Nesta aplicação do algoritmo buscou-se não só a estimação do coeficiente de dispersão, mas também os parâmetros geométricos e hidrodinâmico representativos do trecho do curso d'água em estudo.

No quinto capítulo é descrito o experimento e os materiais utilizados para determinação de parâmetros essenciais à estimação das concentrações, através da solução do

problema direto. Também são relatados brevemente dois procedimentos de determinação da vazão para o curso d'água em questão.

No sexto capítulo são apresentados e comparados os resultados através das curvas de respostas obtidas pelas fórmulas práticas, métodos experimentais e o algoritmo LM. Também foram analisados os resultados obtidos pelo algoritmo utilizando as vazões obtidas por procedimentos relatados no capítulo anterior bem como também foi analisado o uso dos métodos experimentais utilizando parâmetros geométricos e hidrodinâmicos estimados pelo algoritmo LM.

Por fim, no último capítulo são apresentadas as principais conclusões, com suas análises, discussão e algumas considerações.

2 CONCEITOS BÁSICOS EM FENÔMENOS DE TRANSPORTE EM CURSOS D'ÁGUA.

A modelagem do comportamento de um poluente dentro de um rio requer o conhecimento de algumas noções fundamentais. Neste capítulo são abordados os princípios fundamentais e alguns modelos matemáticos que caracterizam o processo de mistura e transporte de poluentes em rios. Antes de dar início à modelagem matemática, algumas definições básicas são dadas para facilitar a apresentação, juntamente com terminologia característica do assunto.

2.1 Conceitos básicos

Alguns conceitos essenciais, associados a fenômenos físicos intervenientes no processo de mistura e dispersão no transporte de substâncias em escoamentos, são apresentados a seguir. Os mecanismos básicos aqui considerados são a difusão molecular, a difusão turbulenta, a advecção e a dispersão.

Difusão molecular: A difusão molecular é a parte do transporte de um soluto em um fluido devido unicamente à agitação (movimento browniano) das moléculas que compõem o fluido. O processo de difusão molecular é regido pela lei de Fick. (FISCHER, 1979)

Difusão Turbulenta: conceito análogo ao da difusão molecular, mas com origem no movimento turbulento do fluido, isto é, nas oscilações em escalas pequenas do campo de velocidades. Macroscopicamente, o campo de velocidades em um dado escoamento pode se apresentar, conforme ilustrado no lado esquerdo da Fig. 2.3. A difusão turbulenta é causada por turbilhões dos mais variados tamanhos e orientações existentes no escoamento. É um processo advectivo com resultados de aparência difusiva. Como não existe ainda uma forma precisa de se quantificar o campo de velocidades instantâneas de um escoamento turbulento, encontrou-se no conceito de difusão turbulenta uma forma alternativa de se computar o efeito da turbulência nos escoamentos e no transporte de poluentes. O efeito sobre um traçador está ilustrado no lado direito da Fig. 2.3.

Advecção: é o processo pelo qual o soluto é carregado pela água em movimento. O caso mais simples da advecção ocorre quando o campo de velocidades é constante e, neste

caso o escoamento tem apenas o efeito de translação da substância (Fig. 2.1). Quando o campo de velocidades varia espacialmente, apresentando gradiente não-nulo, a advecção causa um efeito na substância que não é de uma translação, e neste caso diz-se tratar-se de uma advecção diferenciada conforme pode ser visto ns Fig. 2.2

Dispersão: entende-se por dispersão o efeito resultante da ação conjunta da difusão molecular e/ou turbulenta e da advecção diferenciada.

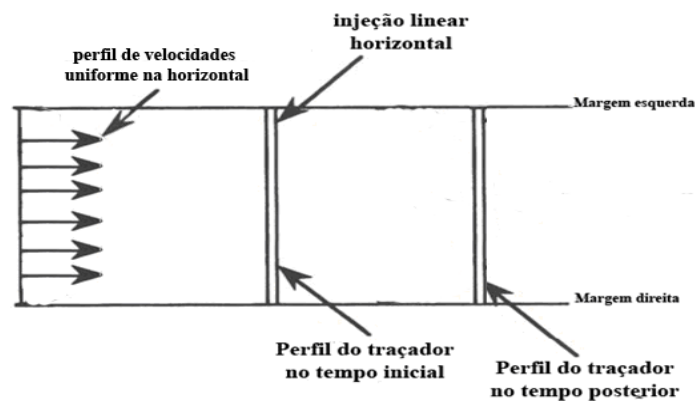


Figura 2.1 - Representação de um trecho do rio para mostrar o efeito advectivo com a presença dos perfil horizontal do campo de velocidade sobre a dispersão de um poluente (adaptado de JABBOUR, 2006).

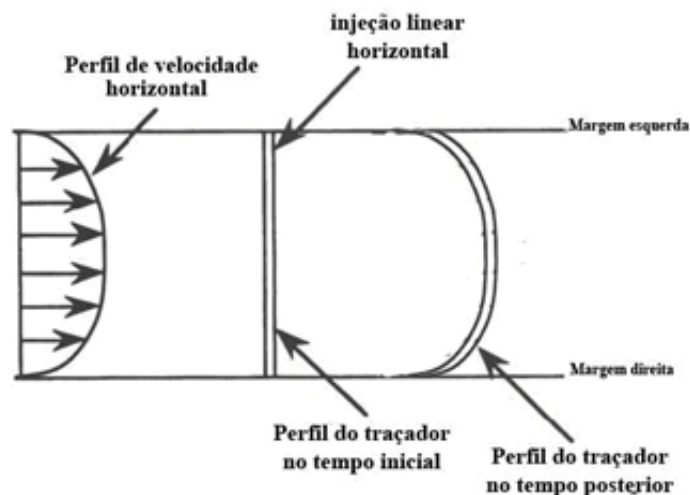


Figura 2.2 - Representação de um trecho do rio para mostrar o efeito de uma advecção diferenciada, provocada pela presença do perfil horizontal do campo de velocidade, sobre a dispersão de um poluente (adaptado de JABBOUR, 2006).

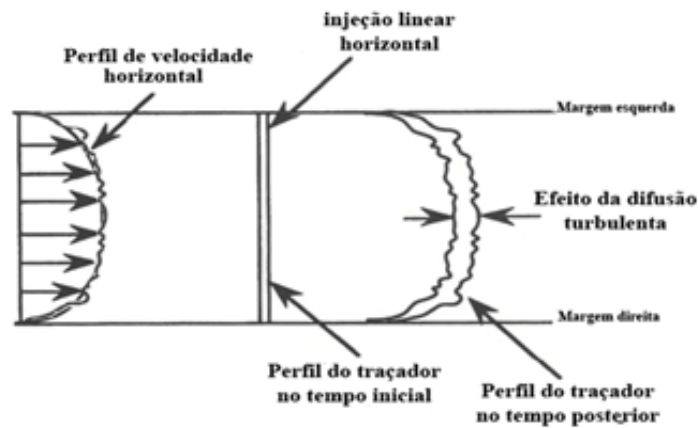


Figura 2.3 - Representação de um trecho do rio para mostrar o efeito da difusão turbulenta, com a presença dos perfil horizontal dos campo de velocidade, sobre a dispersão de um poluente (adaptado de JABBOUR, 2006).

2.2 A equação de advecção-difusão

2.2.1 Difusão molecular

Para descrever os mecanismos de transporte e dispersão de poluentes na modelagem da qualidade de água em corpos hídricos, considera-se, inicialmente, a difusão molecular. Segundo a lei de Fick, a difusão molecular representa o fluxo ou taxa de transferência de massa de um soluto que se difunde através de uma seção de área unitária e que é proporcional ao gradiente da sua concentração, medido segundo a normal a esta seção. Em uma abordagem unidimensional, esse fluxo pode ser expresso por

$$J_d = -D_m \frac{\partial c}{\partial x} \quad (2.1)$$

onde

J_d = “fluxo ou taxa de transporte difusivo”, $[J_d] = \text{ML}^{-2}\text{T}^{-1}$

c = “concentração”, $[c] = \text{ML}^{-3}$;

D_m = “coeficiente de difusão molecular”, $[D_m] = \text{L}^2\text{T}^{-1}$;

x = “direção em que se desenvolve o processo”, $[x] = \text{L}$.

O sinal de menos do lado direito da Eq. (2.1) informa que o transporte se dá da região de maior para a de menor concentração. O processo é considerado desde já como unidimensional, enfoque satisfatório se o corpo hídrico é suficientemente estreito e raso.

A Figura 2.4 ilustra o processo de transporte difusivo unidimensional em que a massa de um constituinte é transferida através de um elemento de volume de controle na direção x . Na Fig. 2.4, J_{de} corresponde ao fluxo de massa difusivo do constituinte na seção de entrada de área A_e , e J_{ds} é o fluxo de massa difusivo na seção de saída de área A_s . O elemento de volume na Fig. 2.4 é um paralelepípedo de largura Δx e de área $A_e = A_s$ e esse valor comum denotamos por A .

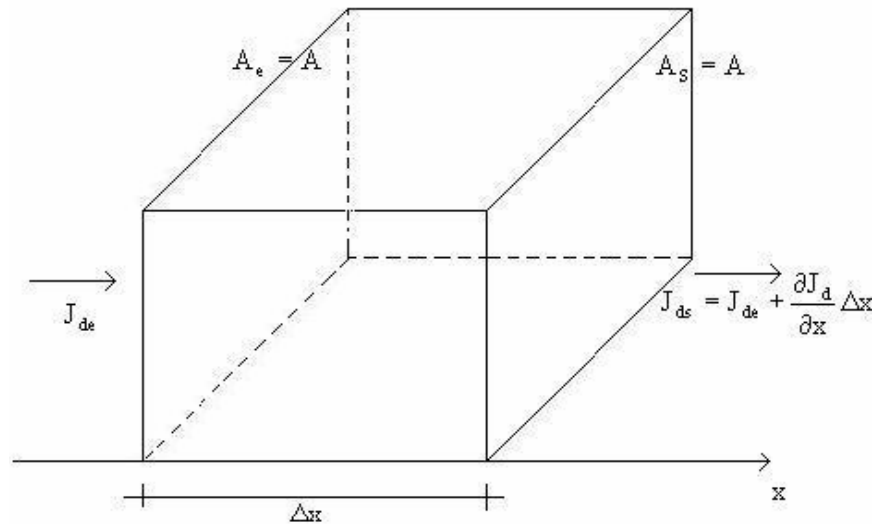


Figura 2.4 – Volume de controle de largura Δx .

Seja $m = m(t)$ a massa da substância no elemento de volume mostrado na Fig. 2.4 no instante t . A taxa de variação de massa no volume de controle de largura Δx , deve ser igual à diferença entre os fluxos de entrada e saída, ou seja

$$(J_{de} - J_{ds})A = \frac{\partial m}{\partial t} \quad (2.2)$$

Aplicando-se a equação da continuidade ou conservação da massa, pode-se ainda escrever para o elemento de volume da Fig. 2.4

$$J_{ds} = J_{de} + \frac{\partial J_d}{\partial x} \Delta x$$

ou

$$J_{de} - J_{ds} = -\frac{\partial J_d}{\partial x} \Delta x \quad (2.3)$$

Das Eqs. (2.2) e (2.3), podemos escrever

$$-\frac{\partial J_d}{\partial x} A \Delta x = \frac{\partial m}{\partial t} \quad (2.4)$$

Substituindo a Eq. (2.1) na Eq. (2.4) temos

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{m}{A \Delta x} \right) = D_m \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \quad (2.5)$$

Como $m/(A \Delta x) = c$ podemos reescrever a Eq. (2.5) como

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D_m \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \quad (2.6)$$

que é a equação diferencial num dado instante t conhecida como equação da difusão na sua forma unidimensional.

A solução fundamental, no caso de interesse para este trabalho, é decorrente de uma injeção instantânea de uma massa M do constituinte, uniformemente distribuída em uma seção transversal de área A , localizada em $x = 0$. A solução é obtida para as seguintes condições iniciais e de contorno

$$\begin{aligned} C(x, 0) &= \frac{M}{A} \delta(x), & -\infty < x < \infty \\ C(\pm\infty, t) &= 0, & t > 0 \end{aligned} \quad (2.7.a)$$

onde $\delta(x)$ denota a função *delta de Dirac* que, fisicamente, representa uma unidade de massa de constituinte dentro de um espaço infinitamente pequeno e que tem a propriedade de ser nula no tempo inicial em todos os lugares, exceto em $x = 0$ (posição de injeção da massa M do constituinte) tal que

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) dx = 1 \quad (2.7.b)$$

Para as condições expressas na Eq. (2.7), a solução é da forma

$$C(x,t) = \frac{M}{A\sqrt{4\pi D_m t}} e^{-\frac{x^2}{4D_m t}}, \quad -\infty < x < \infty, t > 0. \quad (2.8)$$

Se na Eq. (2.8) se considera massa unitária do constituinte, por unidade de área unitária, a Eq. (2.8) é conhecida como uma distribuição normal

$$C(x,t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi D_m t}} e^{-\frac{x^2}{4D_m t}} \quad (2.9)$$

A simetria da função dada na Eq. (2.9) pode ser visualizada na Fig. 2.5

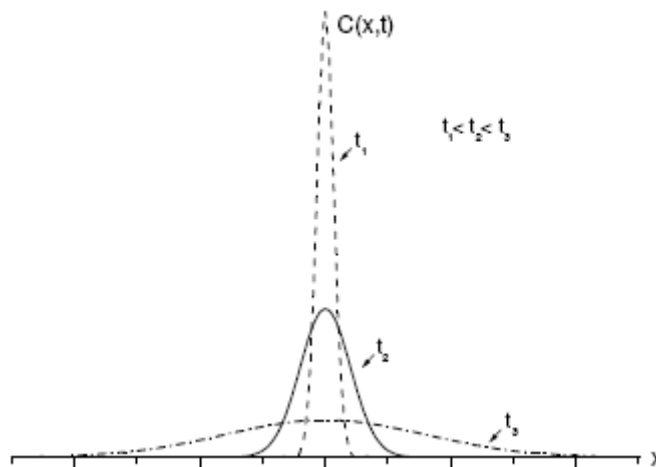


Figura 2.5 – Distribuição normal da concentração $C(x,t)$ versus distância para uma fonte instantânea em três tempos ($t_1 < t_2 < t_3$)

A função densidade de probabilidade da distribuição normal para uma variável aleatória x com variância σ_x^2 é definida como

$$f(x, \sigma) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_x^2}} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma_x^2}\right) \quad (2.10)$$

Comparando as Eqs (2.10) e (2.8) tem-se que

$$2\pi\sigma_x^2 = 4\pi D_m t$$

donde

$$\sigma_x^2 = 2D_m t \quad (2.11)$$

onde $\sigma_x^2 (t)$ é a variância espacial da concentração no tempo t . A Eq. (2.11) indica que essa variância é função linear do tempo. Como σ_x é uma escala espacial, conclui-se que a escala espacial da difusão é $\sigma_x = \sqrt{2D_m t}$, com crescimento muito grande para valores pequenos de t e diminuindo conforme t aumenta.

2.2.2 Advecção-difusão

O transporte de massa do constituinte foi analisado, até agora, considerando-se apenas a difusão molecular. A partir deste ponto, considera-se o fluido apresentando uma velocidade \vec{v} , com componente u na direção longitudinal. Portanto, o “fluxo advectivo”, que é a quantidade de massa transportada pelo campo de velocidade, pode ser representado por

$$J_a = u \cdot c \quad (2.12)$$

sendo

$$c = c(x, t);$$

$$J_a = J_a(x, t), \text{ o fluxo advectivo na direção } x, [J_a] = \text{ML}^{-2}\text{T}^{-1}.$$

Assim, da conservação da massa do fluido, o fluxo de massa com presença da advecção e difusão passa a ser

$$J = u \cdot c - D_m \frac{\partial c}{\partial x} \quad (2.13)$$

Substituindo o fluxo de massa difusivo, J_d da Eq. (2.1) pelo fluxo de massa J da Eq. (2.13) na Eq. (2.4), essa é reescrita como

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(u \cdot c - D_m \frac{\partial c}{\partial x} \right) = - \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{m}{A \Delta x} \right) \quad (2.14)$$

e como $\frac{m}{A \Delta x}$ é a concentração c , reescrevemos a Eq. (2.14)

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial x} = D_m \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \quad (2.15)$$

A Eq. (2.15) é conhecida como a equação da advecção-difusão dada na forma unidimensional.

Para o caso idealizado de um escoamento unidimensional, com velocidade constante u segundo a direção x , e com gradientes de concentração desprezíveis segundo as direções transversais, FISCHER et al. (1979) mostram que a Eq. (2.15) se reduz a uma expressão semelhante à Eq. (2.6), que representa a difusão pura. Para isso, adota-se um sistema *Lagrangeano* de coordenadas

$$\zeta = x - ut \quad (2.16a)$$

$$\tau = t \quad (2.16b)$$

onde ζ é a coordenada que se move para jusante, na direção x , com velocidade u . Após mudança e usando a regra da cadeia, os operadores diferenciais tornam-se

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial \zeta} \frac{\partial \zeta}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial \tau} \frac{\partial \tau}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial \zeta} \quad (2.17)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \tau} \frac{\partial \tau}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial \tau} - u \frac{\partial}{\partial \xi} \quad (2.18)$$

Substituindo os termos das Eqs. (2.17) e (2.18) na equação (2.15) obtemos

$$\frac{\partial c}{\partial \tau} = D_m \frac{\partial^2 c}{\partial \xi^2} \quad (2.19)$$

Dessa forma, a solução fundamental obtida para o caso da difusão pura, como a Eq. (2.6) pode ser usada para o problema de advecção e difusão, mas com uma transformação apropriada de coordenadas. Assim para a mesma fonte plana e instantânea definida pela Eq. (2.7a) como solução fundamental da Eq. (2.19) tem-se

$$C(x, t) = \frac{M}{A\sqrt{4\pi D_m \tau}} e^{-\frac{\xi^2}{4D_m \tau}}$$

ou

$$C(x, t) = \frac{M}{A\sqrt{4\pi D_m t}} e^{-\frac{(x-ut)^2}{4D_m t}} \quad (2.20)$$

2.2.3 Dispersão turbulenta longitudinal

Segundo BARBOSA Jr. (2005), os escoamentos em rios e canais normalmente são turbulentos e, portanto, suas características hidrodinâmicas como velocidade, pressão e massa específica, possuem flutuações aleatórias resultando numa certa desordem das partículas do fluido. Para avaliar os efeitos do transporte turbulento, as quantidades instantâneas são representadas pela superposição de uma flutuação turbulenta ao seu valor médio temporal, de acordo com o modelo de Reynolds,

$$c = \bar{c} + c' \quad (2.21a)$$

$$u = \bar{u} + u' \quad (2.21b)$$

onde

\bar{c} e \bar{u} = “média temporal de c e u , respectivamente”

c' e u' = “média turbulenta de c e u , respectivamente”.

Após a substituição da Eq. (2.21) na Eq. (2.15) e da aplicação da média temporal na equação resultante, considerada a hipótese de serem nulas as médias das flutuações turbulentas e de serem constantes as médias temporais no intervalo de integração, tem-se conforme demonstrado por SOCOLOFSKY (2002)

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} = D_m \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial x^2} - \overline{u'c'} \quad (2.22)$$

Da analogia com a lei de Fick, o termo advectivo de transporte turbulento da Eq. (2.22) é transformado em um termo difusivo escrevendo

$$\overline{u'c'} = -\varepsilon_x \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \quad (2.23)$$

onde ε_x é o coeficiente de difusão turbulenta longitudinal. Assim, a Eq. (2.22) se reescreve como

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} = \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \left[(D_m + \varepsilon_x) \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \right] \quad (2.24)$$

A Eq. (2.24) contém o termo de difusão molecular e turbulenta, embora se reconheça que o espalhamento do soluto devido a turbulência, é muito mais intenso do que aquele devido à difusão molecular ($\varepsilon_x \gg D_m$). Após a mistura completa do traçador ter ocorrido na seção transversal, a principal variação da concentração passa a ocorrer na direção longitudinal. Além disso, em cursos d'água naturais, o processo de mistura que se verifica na direção longitudinal é mais fortemente influenciado pelos gradientes transversais de velocidade (BARBOSA Jr., 2005). Para introduzir os efeitos desses gradientes, os valores temporais da velocidade e da concentração são escritos em termos de quantidades médias na seção transversal,

$$\bar{c} = C + c'' \quad (2.25.1)$$

$$\bar{u} = U + u'' \quad (2.25.2)$$

onde

U e C = “valores médios da velocidade de concentração na seção transversal, respectivamente”.

u'' e c'' = “desvios (espaciais) com relação ao valor médio na direção transversal”.

Tomando-se a média da equação resultante na seção transversal, tem-se, conforme demonstrado por Holley (1969) que

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left[(D_m + \varepsilon_x) \frac{\partial C}{\partial x} - \overline{u'' c''} \right] \quad (2.26)$$

onde a barra dupla indica média espacial. Na Eq. (2.26), o transporte definido pela expressão entre colchetes, semelhantemente à lei de Fick, é admitido como proporcional ao gradiente longitudinal de concentração, isto é,

$$(D_m + \varepsilon_x) \frac{\partial C}{\partial x} - \overline{u'' c''} = E_L \frac{\partial C}{\partial x} \quad (2.27)$$

sendo E_L o coeficiente de dispersão longitudinal. Com a simplificação imposta pela Eq. (2.27), a Eq. (2.26) toma a forma conhecida da equação da advecção-dispersão unidimensional:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} = E_L \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (2.28)$$

A solução fundamental da equação da advecção-dispersão é semelhante àquela representada pela Eq. (2.20) com a transformação de coordenadas conforme a Eqs. (2.16) à (2.18), isto é,

$$C(x, t) = \frac{M}{A\sqrt{4\pi E_L t}} e^{-\frac{(x-Ut)^2}{4E_L t}} \quad (2.29)$$

2.3 Estimativa do comprimento para mistura completa

A equação de advecção-difusão prevê uma evolução gaussiana das concentrações em função do tempo e a uma distância dada. A partir da avaliação de plumas em canais, FISHER et al. (1979) estabelece que, próximo ao ponto de injeção de um dado traçador que seja lançado às margens do canal, o efeito da advecção é dominante. Nessa região inicial, chamada *zona advectiva*, *período inicial* ou *período de Fischer*, a distribuição longitudinal da concentração $C(x,t)$ é assimétrica. Transcorrido um intervalo de tempo considerável, ou após o chamado comprimento advectivo L , indicado na Fig. 2.4, os efeitos da advecção são contrabalanceados pela difusão turbulenta transversal e o perfil de concentração evolui para uma forma gaussiana. A partir daí, a variância passa a aumentar linearmente com o tempo satisfazendo a lei de Fick, como na Eq.(2.11). É nessa fase, denominada *zona de equilíbrio*, que a solução fundamental na Eq.(2.29) torna-se válida.

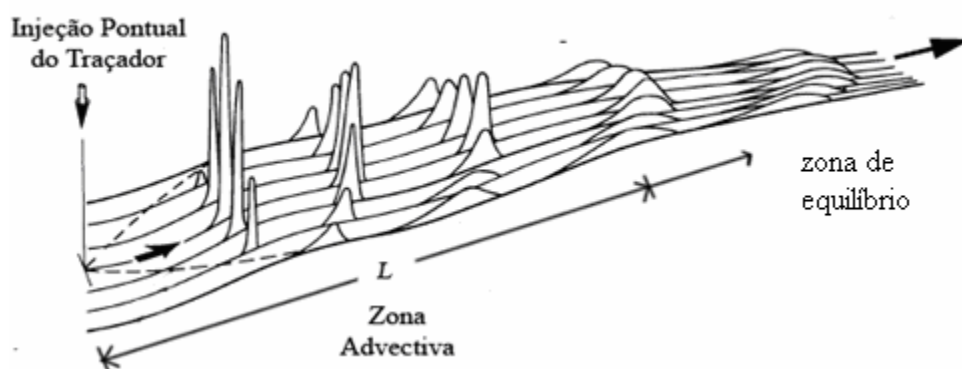


Figura 2.6 – Comportamento da concentração de um traçador ao longo do escoamento a jusante de uma injeção pontual e instantânea (modificado de KILPATRICK, 1993).

A figura 2.6 mostra que na zona de mistura, a variância e a assimetria variam em função da distância. Uma vez que a zona advectiva foi completamente vencida, a variância aumenta linearmente em função da distância. Quanto à assimetria, diminui progressivamente após a zona de mistura completa, até atingir uma zona onde o perfil das concentrações é gaussiano (JABBOUR, 2006).

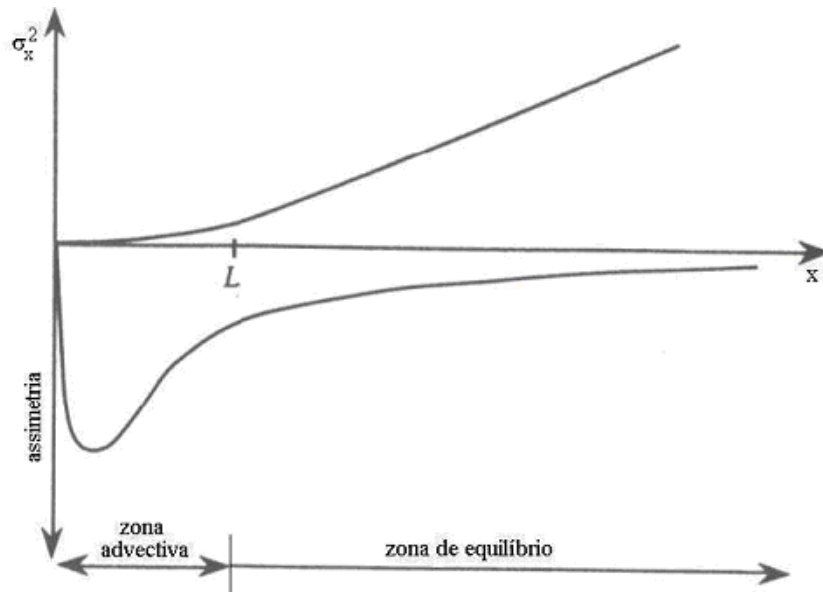


Figura 2.7 - Influência das previsões da Equação Advecção-Dispersão (EAD) sobre a variância e assimetria do perfil das concentrações em função do tempo e da distância (modificado de JABBOUR, 2006).

Portanto, considerando-se o lançamento de um traçador, ou substância conservativa, o comprimento da zona advectiva é a distância necessária para que ocorra a mistura completa dessa substância em toda seção transversal ao escoamento, de modo que se define as zonas de mistura completa e remota (zona de equilíbrio e zona advectiva). Ela depende essencialmente da geometria, dos parâmetros hidrodinâmicos e da posição em que se dá a injeção. Essa abordagem assume que a substância lançada seja completamente solúvel em água e que o lançamento em si não interfira no escoamento do corpo receptor. Contudo, tal comportamento não depende da natureza do constituinte porque considera-se que, por um lado, o produto é inteiramente miscível na água, e por outro lado, que a quantidade de movimento do constituinte, induzida pelo choque do lançamento, não influencia a sua dispersão para além da zona de mistura inicial.

Para estimar o comprimento da zona advectiva (L), pode-se utilizar a equação adaptada de FISCHER *et al.* (1979) apud DEVENS (2006)

$$L = 0,160 \frac{U \cdot B^2}{H^{\frac{3}{2}} \cdot S^{\frac{1}{2}}}, \quad (2.30)$$

onde:

U é a velocidade média do escoamento, em ms^{-1} ;

B é a largura média do trecho de mistura, em m;

H é a profundidade média do escoamento, em m;

S é a declividade média do canal, em mm^{-1} .

Para assegurar-se de que o perfil das concentrações é gaussiano, alguns autores definem um comprimento superior ao comprimento de mistura. Assim, Fischer *et al.* (1979) consideram que o perfil será gaussiano para um comprimento superior à 2,5 vezes o comprimento de mistura ($x \geq 2,5L$). DENTON (1990), RUTHERFORD (1994), LIU & CHENG (1980) apud JABBOUR (2006) sugerem, respectivamente, que esse comprimento deve ser superior a $5L$, $10L$ e $50L$.

3 COEFICIENTE DE DISPERSÃO LONGITUDINAL

A dispersão em cursos fluviais é um fenômeno controlado por algumas variáveis, como a topografia do fundo, presença de gradientes, descarga fluvial e turbulência gerada pelo arrasto na superfície livre (vento) e no fundo (HARRIS. et. al, 1984) sendo, portanto, um mecanismo sujeito a variações espaciais e temporais. Na equação de advecção-dispersão, a magnitude da dispersão é essencialmente parametrizada pelo coeficiente de dispersão, daí a importância de se almejar obter as melhores estimativas para esse parâmetro.

A determinação desse coeficiente pode ser efetuada através de duas formas, uma experimental, baseada em medidas de concentrações, e outra empírica, baseada em modelos que integram as características hidráulicas do curso de água.

Por simplicidade, toda vez que nos referirmos ao coeficiente de dispersão subentende-se que a dispersão é longitudinal.

3.1 Determinação experimental do coeficiente de dispersão

A determinação experimental do coeficiente de dispersão longitudinal é necessária para a melhor simulação do verdadeiro comportamento de um constituinte em um curso de água. Os procedimentos de obtenção do coeficiente de dispersão longitudinal E_L baseiam-se no tratamento das curvas de concentração em função do tempo, curvas essas obtidas através do lançamento de traçador conservativo em ensaios de campo. Os métodos sustentam-se na teoria *fickiana* e, entre os procedimentos mais conhecidos que utilizam dados de apenas uma seção de amostra, destacam-se o método gráfico de Chatwin e o método do pico de concentração.

3.1.1 Método de Chatwin

O método de Chatwin (Chatwin, 1971 apud Devens, 2006) permite calcular o coeficiente de dispersão a partir da solução da equação de advecção-dispersão, como se verá mais adiante.

Da Eq. (2.29), escrevendo

$$k = \frac{M}{2A\sqrt{\pi E_L}}$$

e a solução da equação de advecção-dispersão é,

$$C(x, t) = \frac{k}{\sqrt{t}} e^{-\frac{(x-Ut)^2}{4E_L t}} \quad (3.1)$$

Há dois conceitos importantes a apresentar, o ponto de crista e o valor de crista, e o instante de máximo e o máximo. Fixando o tempo t , a concentração C é função de x . O ponto de crista é o ponto de máximo de C , em função de x , para t fixo, e o valor de crista é o máximo de C , ainda com t fixo. Para obter o ponto de crista, basta derivar C com respeito a x , e igualar a zero,

$$0 = \frac{\partial C}{\partial x} = \frac{k}{\sqrt{t}} e^{-(x-Ut)^2/4E_L t} \cdot \left(-\frac{(x-Ut)}{2E_L t} \right) \quad (3.2)$$

donde

$$x = Ut$$

Já o instante de máximo é o ponto de máximo de C quando a posição x é fixa, ou seja,

$$0 = \frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{1}{2} \frac{k}{t^{3/2}} e^{-(x-Ut)^2/4E_L t} + \frac{k}{t^{1/2}} e^{-(x-Ut)^2/4E_L t} \cdot \left(U \cdot \frac{(x-Ut)}{2E_L t} + \frac{(x-Ut)^2}{4E_L t^2} \right)$$

donde

$$\frac{U(x-Ut)}{E_L} + \frac{(x-Ut)^2}{2E_L t} = 1$$

ou ainda

$$\frac{(x-Ut)(x+Ut)}{2t} = E_L \quad (3.3)$$

A Fig. 3.1 a seguir representa as soluções da Eq. (3.2) e da Eq. (3.3)

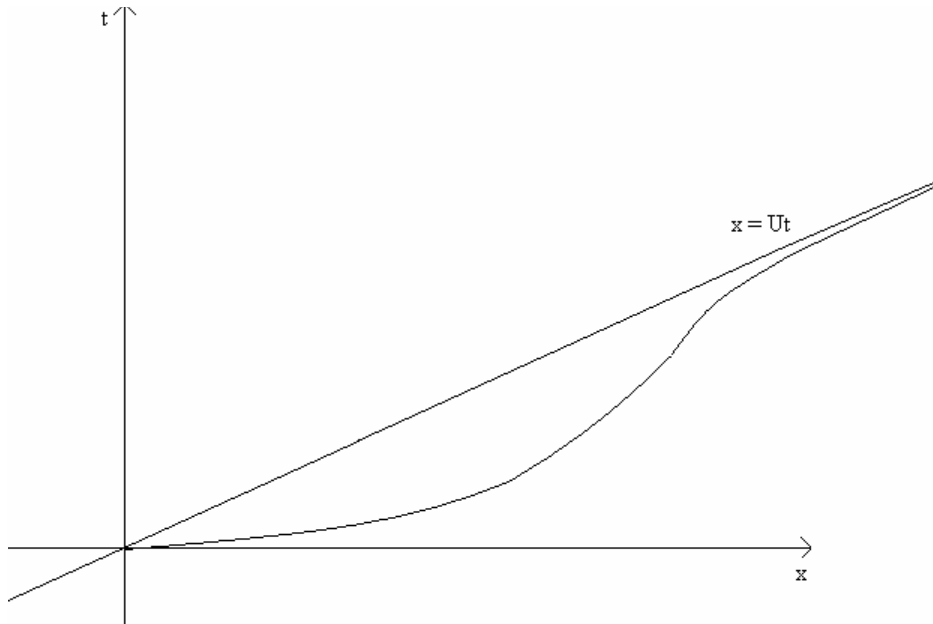


Figura 3.1 – Pontos de crista e instantes de máximo.

Da Eq. (3.3), temos

$$x^2 - (Ut)^2 = 2E_L t$$

ou ainda

$$x = \sqrt{(Ut)^2 + 2E_L t}$$

Quando $t = 0$ segue-se que $x = 0$. Temos ainda

$$\left. \frac{dx}{dt} \right|_{t=0} = \frac{1}{2} \left(\frac{2(U^2 t + E_L)}{((Ut)^2 + E_L t)^{\frac{1}{2}}} \right) \Bigg|_{t=0} = +\infty$$

e

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} \frac{x}{t} = \lim_{t \rightarrow +\infty} \sqrt{U^2 + \frac{2E_L}{t}} = U$$

Assim, a curva da Eq. (3.3) é tangente ao eixo dos x 's quando $t = 0$ e tem por assíntota, quando $t \rightarrow +\infty$, a reta $x - Ut = 0$.

Resolvendo a Eq. (3.3) para t em função de x obtemos:

$$t_p = \frac{\sqrt{(Ux)^2 + E_L^2} - E_L}{U^2} = \frac{x^2}{E_L + \sqrt{(Ux)^2 + E_L^2}}$$

$$t_p = \frac{x}{U} \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{E_L^2}{U^2 x^2} + \frac{E_L}{Ux}}} < \frac{x}{U}$$

Assim, fixando x o instante de tempo em que ocorre o máximo é um pouco anterior ao momento em que x é o ponto de crista ($t_c = x / U$), veja Fig. 3.3. No entanto, se E_L for bem pequeno esse atraso não é significativo. De fato,

$$\lim_{E_L \rightarrow 0} t_p = \frac{x}{U}$$

que coincide com o tempo de crista para a posição x .

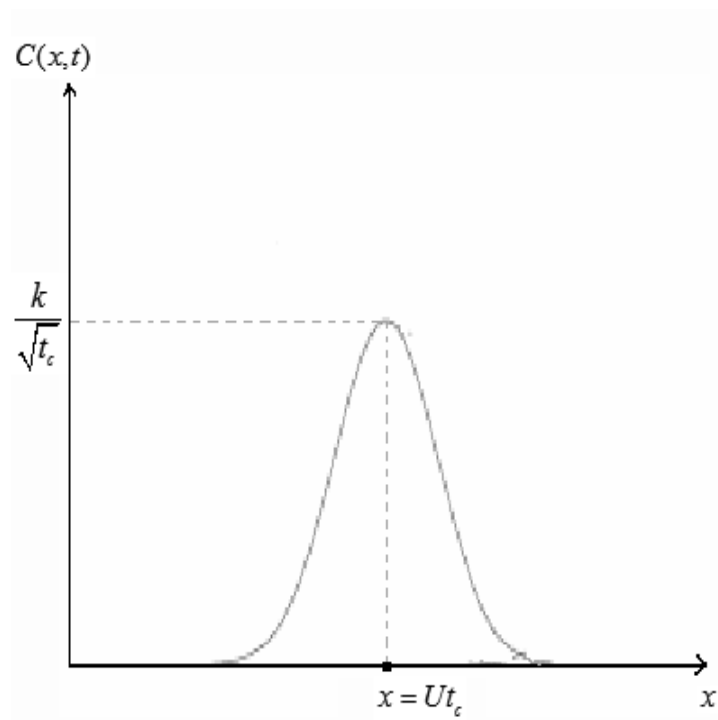


Figura 3.2 – Representação gráfica do ponto de crista

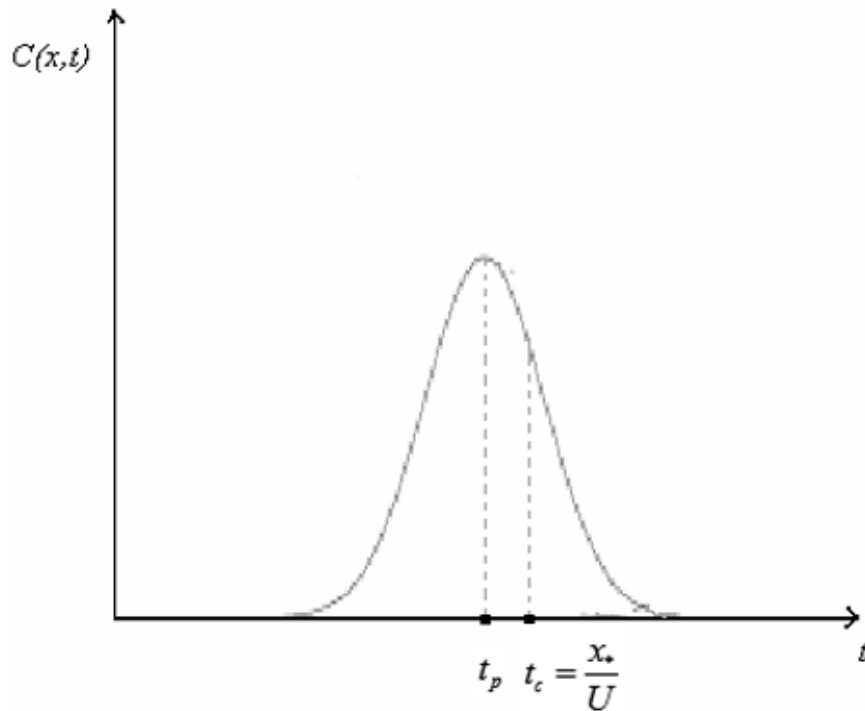


Figura 3.3 – Instante de máxima concentração na posição x^* .

Assumindo então que E_L é bem pequeno, o instante do máximo de concentração t_p e o instante de tempo em que x é ponto de crista, $t_c = x / U$, são praticamente idênticos e a concentração máxima, C_p , na posição x é, aproximadamente, igual a

$$C_p = \frac{k}{\sqrt{t_p}}$$

ou

$$k = C_p \sqrt{t_p} \quad (3.4)$$

Manipulando a Eq. (3.1) e aplicando o logaritmo em ambos os lados, obtém-se

$$\left[t \ln \left(\frac{k}{C \sqrt{t}} \right) \right]^{0,5} = \frac{x}{2\sqrt{E_L}} - \frac{Ut}{2\sqrt{E_L}} \quad (3.5)$$

O coeficiente k é avaliado com base nos valores relativos ao pico de concentração através da Eq. (3.4).

A Equação 3.5 mostra que a variável do primeiro membro apresenta um comportamento linear com o tempo para a quantidade x constante. Com base nos dados de campo, é gerado o conjunto de pares de valores de $\left[t \ln(k/C\sqrt{t}) \right]^{0.5}$ e t , e se o gráfico destas variáveis produz uma linha reta, o modelo *gaussiano* é verificado e o coeficiente de dispersão E_L é obtido da interseção desta linha com o eixo das ordenadas.

O método *Chatwin* apresentado requer dados de C versus t em apenas uma estação de amostragem para o cálculo de E_L , o que implica em custo relativamente mais baixo e em equipe reduzida para realização dos testes de campo. Mas, como esse método se baseia no perfil *gaussiano* de concentração e, na prática, é pouco comum isso ocorrer em cursos d'água naturais, a aplicação do método é limitada por requerer uma definição precisa da inclinação da linha de melhor ajuste.

3.1.2 Método baseado na concentração de pico

Esse outro método direto de estimativa de E_L apóia-se no modelo *fickiano* e baseia-se no conhecimento da concentração de pico, C_p . (DEVENS, 2006). De acordo com a Eq. (2.29), a concentração de pico ocorre quando $x = Ut$, isto é,

$$C_p = \frac{M}{A\sqrt{4\pi E_L t_p}} = \frac{M}{A\sqrt{4\pi E_L x_p / U}}$$

ou

$$C_p = \frac{M}{A\sqrt{4\pi E_L / U}} \frac{1}{\sqrt{x_p}} \quad (3.6)$$

onde

t_p é o tempo onde ocorre a concentração máxima;

x_p é a posição correspondente ao valor de pico da concentração.

Construindo um gráfico de C_p versus $1/\sqrt{x_p}$, a declividade na Eq. (3.2) é igual a $M / A\sqrt{4\pi E_L / U}$, podendo ser obtida da regressão linear dos dados de campo. Dessa forma, conhecendo os outros parâmetros, como a área média da seção transversal, A , a massa M de

traçador injetada e a velocidade média do escoamento U , o valor de E_L pode então ser estimado por esse método.

Uma importante consideração sobre a aplicação do método diz respeito à posição escolhida para as estações (valor de x_p) nos cálculos para a obtenção de E_L . O coeficiente de dispersão é obtido da inclinação de uma reta que é traçada com base em dois únicos pontos (dois pares de valores de C_p e $1/\sqrt{x_p}$). Para tornar os resultados mais confiáveis, buscando-se garantir que o trecho esteja fora da zona advectiva, considera-se a seção de monitoração a jusante e uma seção virtual, localizada no infinito. Para esta última seção, o valor de $1/\sqrt{x_p}$ e o valor da concentração de pico são tornados nulos, o que faz com que a linha reta passe pela origem num gráfico de C_p e $1/\sqrt{x_p}$. Por conseguinte, para encontrar a declividade de C_p versus $1/\sqrt{x_p}$, a linha é traçada a partir da origem dos eixos coordenados, uma vez que a origem corresponde a uma seção idealizada, infinitamente distante da fonte, onde a concentração é nula.

3.2 Determinação através de fórmulas empíricas

A importância de uma boa estimativa do coeficiente de dispersão longitudinal tem levado, durante três décadas, muitos pesquisadores a desenvolverem fórmulas analíticas adaptadas às diferentes características hidráulicas dos cursos de água. Todos estes modelos são baseados nas características geométricas e dinâmicas do curso de água como a altura, a largura, a velocidade da corrente, a velocidade de atrito dentre outras. Neste trabalho, algumas foram abordadas, e são apresentadas em função dos seus domínios de aplicação.

3.2.1 Fórmula de Elder

Para a aplicação ao escoamento em condutos livres, uma extensão da análise de Taylor foi feita por Elder em 1959. Elder, em seus estudos, propôs um valor constante para o coeficiente de dispersão longitudinal adimensional, na forma (FISCHER et al., 1979)

$$E_L = 5,93HU^* \quad (3.7)$$

onde

H é a profundidade, em m;

U^* é a velocidade de atrito, em ms^{-1} ;

Para um fluxo em canais abertos uniformes a velocidade de atrito é definida como

$$U^* = \sqrt{gHS}$$

onde

g é a aceleração da gravidade, em ms^{-2} .

S é a declividade do canal, em mm^{-1} .

3.2.2 Fórmula de Mcquivey e Keefer

MCQUIVEY e KEEFER (1974) propuseram um método simples de previsão de E_L a partir de correlações com dados de campo de 18 cursos d'água naturais em 14 diferentes estágios. Baseando-se em uma analogia entre as equações de fluxo linear unidimensional e a equação linear unidimensional da dispersão, obtiveram

$$E_L = 0,058 \frac{HU}{S} \text{ para } F < 0,5 \quad (3.8)$$

onde

F é o número adimensional de Froude;

U é a velocidade média do escoamento.

Esta equação foi desenvolvida para regimes de escoamentos fluviais para um número de Froude, que caracteriza, num líquido, a importância relativa das forças ligadas à velocidade e a força de gravidade, inferior à 0,5 (JABBOUR, 2006).

3.2.3 Fórmula de Fischer

FISCHER et al. (1979) desenvolveram uma fórmula analítica baseada em resultados da fórmula de McQuivey e de Keefers e fazendo considerações adicionais apresentaram sua fórmula prática simplificada para cursos d'água naturais escrevendo

$$E_L = 0,011 \frac{U^2 B^2}{HU^*} \quad (3.9)$$

onde B é a largura curso d'água (m).

A simplicidade desta formulação reside na utilização dos valores médios sobre toda a seção do curso de água.

3.2.4 Fórmula de Liu

LIU (1977) encontrou grandes erros na previsão de E_L através das fórmulas práticas de McQuivey e Keefers e de Fischer, que produziram valores de E_L que foram, respectivamente, 715 e 18 vezes maiores do que os medidos. Liu, a partir de um modelo apresentado por Fischer, que considera as variações laterais de velocidade, propôs um modelo simples para canais largos, com E_L expresso por

$$E_L = 0,18 \left(\frac{U^*}{U} \right)^{1,5} \frac{U^2 B^2}{HU^*} \quad (3.10)$$

3.2.5 Fórmula de Magazine

MAGAZINE et al. (1988), apud JABBOUR (2006), estudou os efeitos da rugosidade sobre a dispersão. Ele obteve uma equação empírica baseando-se no número de Reynolds e obteve a seguinte fórmula

$$E_L = \left(0,4 \frac{U^*}{U} \right)^{-1,632} 75,86 R_H U \quad (3.11)$$

onde $\left(0,4 \frac{U^*}{U}\right)^{-1,632}$ é o parâmetro de rugosidade geral e R_H é o raio hidráulico que para canais largos e pouco profundos, pode ser aproximado por H , em m.

3.2.6 Fórmula de Iwasa e Aya

IWASA e AYA (1991) relacionaram o coeficiente de dispersão com a razão largura-profundidade para propor o modelo escrito como

$$E_L = 2 \left(\frac{B}{H} \right)^{1,5} HU^* \quad (3.12)$$

Como esta equação baseou-se essencialmente em dados procedentes de experiências efetuadas em um canal de laboratório, o modelo geralmente subestima a dispersão em cursos d'água naturais (JABBOUR, 2006).

3.2.7 Fórmula de Seo e Cheong

Para determinação do coeficiente de dispersão longitudinal em rios naturais, *Seo* e *Cheong* desenvolvem uma fórmula nova baseada em uma análise dimensional em conjunto com uma regressão utilizando 59 conjuntos de dados, medidos em 26 rios dos Estados Unidos. Dos 59 conjuntos de dados, 35 foram utilizados para estabelecer o modelo e os demais para validar a equação (SEO e CHEONG 1998, apud JABBOUR, 2006). A equação pode ser escrita como

$$5,915 \left(\frac{B}{H} \right)^{0,620} \left(\frac{U}{U^*} \right)^{1,428} HU^* \quad (3.13)$$

com toda as unidades no Sistema Internacional (SI).

3.2.8 Fórmula de Koussis e Rodriguez-Mirasol

KOUSSIS e RODRIGUEZ-MIRASOL (1998) usaram a teoria de Fischer e uma regressão de dezesseis dados obtidos da literatura aplicando a lei de Karman obtendo assim a equação seguinte

$$E_L = 0,6 \frac{U^* B^2}{H} \quad (3.14)$$

com as unidades no SI.

3.2.9 Fórmula de Kasherfipour e Falconer

Para estimar o coeficiente de dispersão longitudinal em rios, KASHERFIPOUR e FALCONER (2002) desenvolveram duas equações com base em três diferentes estudos de dispersão. Dos dados de campo de 30 rios dos Estados Unidos, todos retirados dos trabalhos de Fischer, de McQuivey e Keefer, e de Seo e Cheong, uma primeira relação foi estabelecida na forma

$$E_L = 10,612HU \left(\frac{U}{U^*} \right) \quad (3.15)$$

com todas as unidades no SI.

A Eq. (3.11) foi, então, comparada com as equações de Fischer, McQuivey e Keefer, e Seo e Cheong e também com a formulação de Koussis e Rodriguez-Mirasol. A comparação foi feita usando métodos estatísticos e mostrou que o modelo representado pela equação anterior é superior aos demais.

Por tentativa e erro, a combinação linear de 70% da Eq. (3.11) e 30% da equação de Seo e Cheong (Eq. (3.9)) resultou em um novo modelo, apresentado na forma

$$E_L = \left[7,428 + 1,775 \left(\frac{B}{H} \right)^{0,620} \left(\frac{U^*}{U} \right)^{0,572} \right] HU \left(\frac{U}{U^*} \right) \quad (3.16)$$

com todas as unidades no SI.

Kasherfipour e Falconer sugerem, ainda, que melhores previsões de E_L para canais abertos podem ser obtidas aplicando-se a Eq (3.12) com a razão largura-profundidade, $B / H > 50$, e a Eq.(3.11), para a relação $B / H < 50$.

4 O PROBLEMA INVERSO

Segundo SILVA NETO e MOURA NETO (2005), os problemas inversos são classificados levando em consideração a dimensão do modelo matemático e a dimensão dos objetos a serem estimados. Esta classificação está apresentada na Tabela 4.1.

Tabela 4.1: Classificação dos problemas inversos

Modelo Matemático	Estimativa	
	Dimensão finita (constante)	Dimensão infinita (função)
Dimensão finita ¹	Tipo I	Não se aplica
Dimensão infinita ²	Tipo II	Tipo III

¹ por exemplo: sistema de equações algébricas

² por exemplo: equação diferencial parcial ou equação integro-diferencial

O problema inverso aqui considerado consiste na estimação dos parâmetros da solução da equação de advecção-difusão unidimensional, Eq. (2.29), a partir de medidas experimentais das concentrações da solução colhidas no curso d'água em função do tempo. Tem-se, portanto um problema inverso do Tipo II, ou seja, o modelo matemático é de dimensão infinita e a estimativa de dimensão finita.

4.1 Formulação do problema inverso

Para o processo de estimação das concentrações de um soluto injetado no curso d'água, segundo a formulação apresentada no capítulo 2, tem-se o interesse em estimar simultaneamente as incógnitas, que são os parâmetros A , U e E_L da Eq. (2.29).

Suponhamos que um soluto é injetado na posição $x = 0$ e medidas de concentração sejam efetuadas numa posição x_L a jusante de $x = 0$, em instantes de tempo t_i , denotando Y_i . Seja $\vec{\beta} = (A, U, E_L)$ e denote $C_i(\vec{\beta})$ a solução de concentração definida pela Eq. (2.29) no ponto x_L e no tempo t_i , fazendo referência explícita à dependência em $\vec{\beta}$, $C_i(\vec{\beta}) = C(x_i, t_i)$.

Como a quantidade de medidas experimentais, N , é superior ao número de parâmetros a serem estimadas, o problema inverso é resolvido como um problema de otimização de dimensão finita onde busca-se minimizar o funcional de resíduos quadrados

$$S(\vec{\beta}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N [C_i(\vec{\beta}) - Y_i]^2 = \frac{1}{2} \mathbf{R}^T \mathbf{R} \quad (4.1)$$

onde $\mathbf{R} = (R_1, \dots, R_N)^t \in \mathbb{R}^N$ é o vetor de resíduos com $R_i = C_i(\vec{\beta}) - Y_i$, $i = 1, 2, \dots, N$.

4.2 Solução do problema inverso: método de Levenberg-Marquardt

Para a determinação da solução do problema inverso de estimação dos parâmetros A , U e E_L , descrito na seção anterior, foi usado o método de Levenberg-Marquardt (D.W. MARQUARDT, 1963 apud SILVA NETO e MOURA NETO, 2005).

Buscando minimizar a função S é primeiramente escrita a equação do ponto crítico

$$\frac{\partial S}{\partial \beta_j} = \frac{\partial}{\partial \beta_j} (\mathbf{R}^t \mathbf{R}) = 0 \quad j = 1, 2, 3 \quad (4.2)$$

constituindo, portanto um sistema de 3 equações não-lineares a 3 incógnitas, $\vec{\beta}$. Das Eqs. (4.1) e (4.2), reescreve-se a equação do ponto crítico como

$$\sum_{i=1}^N R_i \frac{\partial C_i}{\partial \beta_j} = 0 \quad j = 1, 2, 3 \quad (4.3)$$

Resolve-se a Eq. (4.3) por meio de um *método* modificado de *Newton*. Usando uma expansão de Taylor de R_i em torno de $\vec{\beta}^n$ onde n será, posteriormente, o índice das iterações no procedimento iterativo, e retendo apenas até os termos de primeira ordem, temos:

$$R_i^{n+1} = R_i^n + \sum_{j=1}^3 \frac{\partial R_i^n}{\partial \beta_j} \Delta \beta_j^n, \quad i = 1, 2, \dots, N. \quad (4.4)$$

Aqui R^n denota a avaliação de R em β^n , e $\Delta\beta^n = \beta^{n+1} - \beta^n$ (isto é, $R_i^n = R_i(\beta^n)$ e $\Delta\beta_j^n = \beta_j^{n+1} - \beta_j^n$). Levando a Eq. (4.4), no sistema Eq. (4.3), e observando que $\partial R_i / \partial \beta_j = \partial C_i / \partial \beta_j$, para $i = 1, 2, \dots, N$ e $j = 1, 2, 3$, obtém-se

$$\sum_{j=1}^3 \left(R_i^n + \sum_{k=1}^3 \frac{\partial C_i}{\partial \beta_k} \Big|_{\beta=\beta^n} \Delta\beta_k^n \right) \frac{\partial C_i}{\partial \beta_j} \Big|_{\beta=\beta^n} = 0 \quad (4.5)$$

Usando a definição da matriz Jacobiana com os elementos denotados por $J_{ij} = \partial C_i / \partial \beta_j$, para $i = 1, 2, \dots, N, j = 1, 2, 3$, o sistema dado na Eq. (4.5) é reescrito na forma conhecida por *equação normal*

$$(J^n)^t J^n \Delta \vec{\beta}^n = -(J^n)^t R^n \quad (4.6)$$

onde J^n é a matriz Jacobiana avaliada em β^n . A solução é representada por

$$\Delta \vec{\beta}^n = -[(J^n)^t J^n]^{-1} (J^n)^t R^n \quad (4.7)$$

Um procedimento iterativo é construído para a determinação do vetor de incógnitas $\vec{\beta}$ que minimize o funcional S , sendo conhecidos dados experimentais Y_i e valores calculados C_i que dependem das incógnitas a serem determinadas, $\vec{\beta}$.

A partir de uma estimativa inicial β^0 , são calculadas, sequencialmente, correções obtidas a partir da Eq. (4.7), onde n é um contador de iterações, e as novas estimativas para o vetor de incógnitas,

$$\vec{\beta}^{n+1} = \vec{\beta}^n + \Delta \vec{\beta}^n \quad (4.8)$$

As iterações são interrompidas quando um critério de convergência definido *a priori* é satisfeito, como por exemplo, $|\Delta\beta_j^n / \beta_j^n| < \varepsilon$, para todo j com $j = 1, 2, 3$ e onde ε é um valor suficientemente pequeno. A cada iteração são calculados os valores $C_i^n = C_i(\vec{\beta}^n)$, $i = 1, 2, \dots$,

N , usando as estimativas para as incógnitas $\vec{\beta}^n$. Isto envolve, neste estudo, a solução da equação de advecção-difusão.

Este método apresentado é do tipo Newton, e pode apresentar dificuldade de convergência se a estimativa inicial para o vetor de incógnitas $\vec{\beta}^0$, não for adequadamente escolhida. Segundo Silva Neto e Moura Neto (2005) a escolha de uma estimativa inicial adequada pode ser extremamente difícil, exigindo cálculos computacionais intensivos que, normalmente, não são feitos em aplicações práticas.

MARQUARDT (1963) propôs, então, o algoritmo que será descrito a seguir, visando a permitir a convergência do método para um conjunto mais amplo de valores da estimativa inicial. Pelo fato de ter havido uma proposta semelhante em 1944 por Levenberg que, consistia em adicionar um termo na diagonal da matriz $J^t J$, o método passou, então, a ser conhecido como *método de Levenberg-Maquardt*.

A partir da Eq. (4.6), escreve-se

$$\left[(J^n)^t J^n + \lambda^n I \right] \Delta \beta^n = -(J^n)^t R^n \quad (4.9)$$

onde λ é o *fator de amortecimento* e I representa a matriz identidade.

Então, o procedimento iterativo é construído com a Eq.(4.9) e a partir de uma estimativa inicial β^0 , são calculadas, sequencialmente, correções

$$\Delta \beta^n = - \left[(J^n)^t J^n + \lambda^n I \right]^{-1} (J^n)^t R^n \quad (4.10)$$

onde n é um contador de iterações, e as novas estimativas para o vetor de incógnitas são calculadas pela Eq.(4.8). As iterações são interrompidas quando um critério de parada é satisfeito *a priori*.

A solução do problema descrito pela Eq. (4.9) é diferente daquela descrita pela Eq.(4.6). Por outro lado, o objetivo é resolver a Eq.(4.3). De forma a garantir a convergência, no início do procedimento iterativo é arbitrado um valor relativamente alto para λ , λ^0 , enfatizando, portanto, a importância da diagonal da matriz $\left((J^n)^t J^n + \lambda^n I \right)$ em detrimento da informação contida nos elementos fora da diagonal. Alguns autores escalando cada componente do gradiente de acordo com a curvatura de forma que haja um movimento maior

na direção do gradiente pequeno, evitando uma convergência lenta nesta direção, utilizam uma substituição da matriz identidade, na Eq. (4.10), pela diagonal da matriz Hessiana $J^t J$.

$$\Delta\beta^n = -\left[(J^n)^t J^n + \lambda^n \text{diag}((J^n)^t J^n) \right]^{-1} (J^n)^t R^n \quad (4.11)$$

Durante o procedimento iterativo, busca-se reduzir o valor do fator de amortecimento, λ , de forma que, ao satisfazer o critério de parada, ele seja próximo de zero.

Um possível algoritmo para o controle do valor do fator de amortecimento será descrito a seguir. Seja um valor λ^0 e uma constante $v > 1$. Faça $\lambda = \lambda^0$ e calcule a soma dos resíduos quadrados $S(\vec{\beta}^n)$ com $\vec{\beta}^n$ determinado na iteração n com o fator de amortecimento $\lambda = \lambda^0$ e posteriormente com λ/v . Se ambas forem maiores que a soma determinada com a estimativa inicial $\vec{\beta}^0$, será feito um aumento no fator de amortecimento λ multiplicando-o por v até que se obtenha, através da resolução da Eq. (4.11), um vetor $\vec{\beta}^*$ que garanta a soma dos resíduos menor do que a produzida $\vec{\beta}^0$. Com isso, $\lambda = \lambda v^k$, onde $k > 1$ é uma constante previamente estipulada. Se o uso do fator de amortecimento λ/v resulta em uma redução da soma dos resíduos quadrados então este é tomado como novo valor de λ e um novo vetor de estimativa $\vec{\beta}^n$ é obtido com este fator e o processo continua; Se o uso do fator λ/v resultar em um resíduo maior, mas usando o $\lambda = \lambda^0$ resultar em um melhor resíduo, λ é deixado inalterado e a estimativa $\vec{\beta}$ é tomada como a otimizada caso um critério de convergência definido *a priori* seja satisfeito. O critério de parada aqui utilizado é descrito como $|\Delta\beta_j^n / \beta_j^n| < \varepsilon$, para todo $j = 1, 2, 3$, e onde ε é um valor suficientemente pequeno, digamos 10^{-5} .

5 METODOLOGIA E DESCRIÇÃO DO EXPERIMENTO

5.1 Localização da área de estudo

A área de estudo localiza-se na Região Serrana do Estado do Rio de Janeiro dentro da bacia do rio Macaé. Dentre as bacias hidrográficas localizadas unicamente no Estado, essa é a de maior extensão, com uma área de drenagem de aproximadamente 1.765 km² e com população aproximada de 141.000 habitantes. Essa bacia engloba praticamente toda a área dos limites territoriais do Município de Macaé, com cerca de 1.448 km², e ainda áreas dos municípios de Nova Friburgo (142 km²), Casimiro de Abreu (83 km²), Rio das Ostras (11 km²), Conceição de Macabu (70 km²) e Carapebus (11 km²).

Segundo MARÇAL e LUZ. (2003), a área da bacia do rio Macaé possui características climáticas bastante diversificadas devido aos fatores físicos como altitude, disposição do relevo da bacia de drenagem e a presença do oceano Atlântico. A temperatura média anual fica em torno de 22°C no verão e 19°C no inverno, e a pluviosidade anual fica entre 1.000 e 1.500 mm.

O rio São Pedro localiza-se na região superior da bacia, aqui denominada de Alto Macaé e caracteriza-se por apresentar o relevo acidentado pertencente à Serra do Mar e grande biodiversidade em remanescentes da Mata Atlântica, o que levou à criação da APA de Macaé de Cima. Nessa mesma área, há a presença histórica de aglomerações rurais, que sobrevivem, basicamente, da pecuária e da agricultura familiar e utilizam os rios para o abastecimento doméstico, para a irrigação de culturas, para a manutenção da vida de animais e, também, como receptor de águas provenientes das áreas de cultivos e de despejos domésticos (MARÇAL e Luz, 2003).

5.2 Caracterização da área de estudo

A microbacia hidrográfica do rio São Pedro está situada politicamente nos distritos de São Pedro da Serra e Lumiar, e geograficamente na Serra do Mar, englobando as Serras de Macaé e da Sibéria, delimitada pelas latitudes de 22° 20' S e 22° 17' S e longitudes de 42° 19' W e 42° 23' W (Figura 5.1). Possuindo suas nascentes na Pedra Mafort, o Rio São Pedro é tributário do Rio Boa Esperança, que por sua vez é afluente do Rio Macaé. A maior parte dessa microbacia é drenada pelos córregos da Tapera, Benfica, Sibéria e Eller, que possuem

leitos pedregosos e encaixados em falhas e fraturas, correm paralelos na direção SW-NE, formando vales de aproximadamente 6 km de extensão.



Figura 5.1- Localização do distrito de São Pedro da Serra
(fonte: <http://www.cidadedoriodejaneiro.com.br/artigo.php?ciitId=4459>)

5.3 A problemática da área de estudo

Diversas atividades afetam a qualidade da água dos rios da bacia do Macaé, a saber: extração de petróleo e gás, expansão urbana desordenada, agropecuária e agroindústria, além do turismo sem planejamento. Na região superior do Alto Macaé, os principais impactos sobre a qualidade da água são originados na apropriação indevida de terras públicas ao longo das margens dos rios, à erosão devido à destruição ilegal das matas ciliares, à retirada de areia de vários cursos de água, às edificações erguidas nas margens dos rios, principalmente, à poluição por esgotos, lançados principalmente nas vilas de Lumiar e São Pedro da Serra, à precariedade dos sistemas de coleta e tratamento de esgotos, à intensificação de processos erosivos provocados por atividades agropecuárias, obras urbanas e às estradas de terra com taludes e sistemas de drenagem inadequados, acarretando perdas de solo e assoreamento dos corpos hídricos. Tais alterações tornam-se ainda mais preocupantes se for considerado que a

região do Alto Macaé, por exemplo, compreende territórios de três unidades de conservação, as APA's municipais de Rio Bonito e Macaé de Cima e a APA estadual de Macaé de Cima.

Nos últimos anos, essa região vem sendo sistematicamente agredida por desmatamentos, queimadas, obras impactantes nas margens dos rios, com terraplanagens e corte de encostas, que aumentam os processos erosivos e de assoreamento dos cursos d'água. A fragmentação de propriedades, os loteamentos e a urbanização descontrolada são desenvolvidos diante da omissão dos órgãos ambientais. O crescimento do volume de lixo, cujo armazenamento e coleta funcionam de forma bem insatisfatória, aumenta a poluição dos córregos e nascentes, já afetados pelo uso indiscriminado de agrotóxico e por despejos de esgotos domésticos.

Dessa maneira, são extremamente relevantes estudos ambientais que, de maneira conjugada, possam contribuir para o presente diagnóstico da bacia hidrográfica do Macaé e para previsão de futuros cenários. Por outro lado, a clara conexão hidráulica entre os habitantes de uma dada bacia hidrográfica, preconizada no modelo de gestão enunciado na Lei 9433/97, impõe que a grande complexidade do sistema físico seja de alguma forma simplificada por modelos que venham a servir de suporte a decisões. Assim, tendo-se consciência de suas limitações, os modelos matemáticos podem ser utilizados para manipular a imensa gama de variáveis que podem condicionar a qualidade de água de um rio, abordagem que aqui se pretende aplicar ao Macaé.

5.4 Materiais e métodos

5.4.1 Introdução

O desenvolvimento de experimentos busca simular um cenário de poluição acidental num curso de água e são baseados em injeções instantâneas ou contínuas, de produtos químicos miscíveis e com uma densidade equivalente à da água. Para isso, é necessário escolher o traçador que simula o produto injetado e definir os meios de injeção, seção de amostragem e análise das amostras. Finalmente, a escolha dos parâmetros a estudar para validar o modelo de dispersão é abordada (concentrações máximas, tempos de passagem da poluição...) assim como índices estatísticos necessários a avaliar os desempenhos dos modelos de dispersão.

Todos os equipamentos, materiais e procedimentos apresentados a seguir foram utilizados na execução dos testes de campo, utilizando-se de uma solução salina como

traçador para a determinação do coeficiente de dispersão longitudinal no curso d'água em estudo.

5.4.2 Parâmetros físicos e hidrodinâmicos

Para o uso da solução da equação de advecção e difusão como também das fórmulas práticas de obtenção do coeficiente de dispersão alguns parâmetros geométricos, físicos e hidrodinâmicos foram obtidos nas campanhas de campo.

Para o curso d'água em estudo, foi feito um levantamento batimétrico e altimétrico. Dessa forma, para a obtenção da profundidade média H e da largura média B , foram executadas batimetrias em uma seção ao longo do trecho de estudo. O levantamento batimétrico foi executado utilizando-se trena e régua milimetrada. Através do levantamento altimétrico do trecho em estudo, obteve-se a declividade média S .

A construção, implementação e validação do modelo exige um conjunto de entradas, como condições de contorno, fontes externas, reações internas e a forma do corpo hídrico a ser representado no modelo. Dentre essas entradas necessárias ao modelo, uma das mais importantes é a vazão do corpo hídrico modelado. Essa define não só a velocidade com que substâncias passivas são transportadas, mas o próprio processo de diluição de cargas que aportem ao corpo de água receptor.

5.4.3 Métodos de determinação da vazão

Há diversas formas de determinar-se a vazão, Q , em escoamentos naturais, destacando-se aquele que se baseia no cálculo de seções transversais, A , e na medição de velocidades médias na seção, U , a vazão sendo expressa simplesmente como o produto $Q = U.A$. Esse método mostra-se muito eficaz para cursos que tenham geometria estável e campo de velocidades bem comportado, o que não se verifica em rios encachoeirados, por exemplo, onde o escoamento é essencialmente tridimensional e excessivamente turbulento. Em tais regiões, a forma mais adequada de determinação de vazões se dá pela aplicação do método químico. Será apresentado uma descrição breve dos métodos de determinação da vazão de rios retirados do estudo realizados por SILVA (2009).

5.4.3.1 Método das seções ou método do molinete

O método das seções é um método prático para estimar a vazão em cursos d'água que é feito de forma indireta, a partir da medição da velocidade da água em diversos pontos de uma seção transversal do rio, de uma margem a outra (Fig. 5.2). Em cada perfil vertical dessa seção é medida a velocidade da água do rio com o molinete e a profundidade do local (Fig. 5.3). Com isso, a seção transversal do rio estará dividida em inúmeras outras e para cada subseção calcula-se a área e a média das velocidades, a partir do molinete em cada vertical. Somando-se as vazões em cada subseção tem-se a vazão total do rio.

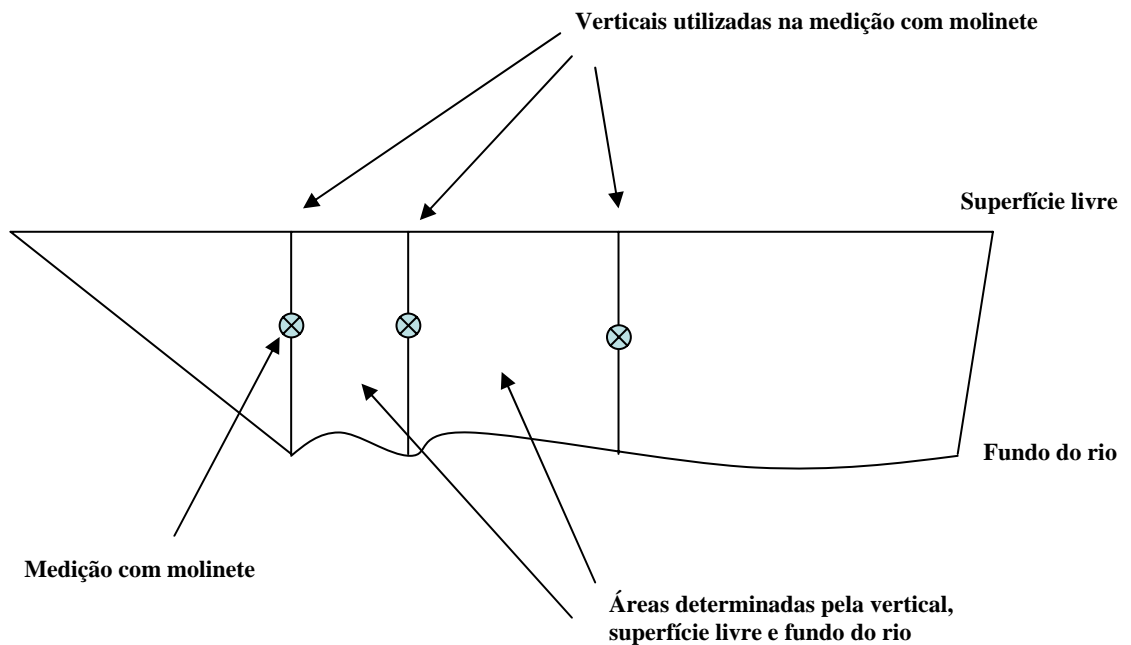


Figura 5.2 – Esquema de uma seção transversal de um rio e a posição dos perfis verticais.



Figura 5.3 – Foto com a utilização do molinete na seção de injeção (SILVA, 2009)

5.4.3.2 Método químico

O método químico de determinação de vazões baseia-se na premissa essencial de que a vazão do rio avaliado, Q_R , não varia dentro do intervalo de tempo de determinação. Isso assumido, se uma descarga não transiente de substância conservativa, Q_E , for lançada no rio por um efluente, vaso de Mariotte (Figura 5.4), após a zona advectiva, ocorrerá homogeneização em toda seção transversal, ou seja, em qualquer ponto da seção será observada a mesma concentração resultante, C_f .



Figura 5.4 – Vaso de Mariotte utilizado na determinação da vazão pelo método químico (SILVA, 2009)

A vazão do rio pode ser encontrada pelo princípio de conservação de massa como

$$Q_R C_R + Q_E C_E = (Q_R + Q_E) C_f \quad (5.1)$$

onde, Q_E e C_E são respectivamente a descarga e a concentração do efluente e Q_R e C_R a descarga e a concentração do rio antes do efluente. Considerando-se que $Q_R \gg Q_E$, a expressão acima se reduz a:

$$Q_R C_R + Q_E C_E = Q_R C_f \quad (5.2)$$

Reescrevendo a Eq. (5.2), tem-se a vazão do rio:

$$Q_R = \frac{Q_E C_E}{C_F - C_R} \quad (5.3)$$

No método químico, como o solvente é a água e o sal é o soluto, é possível formar uma mistura homogênea, onde o sal é dissolvido na água. Utiliza-se uma solução insaturada de sal, pois desse modo não haverá perda de massa devido à precipitação.

5.4.4 Considerações sobre o traçador

De acordo com RIGO e TEIXEIRA (1995), os traçadores são utilizados para determinar o modo como alguma substância conservativa, dissolvida no escoamento, mistura-se ao longo de uma unidade e, deste modo, também infere sobre o movimento do próprio fluido que escoar.

No estudo da dispersão em cursos d'água naturais, o traçador é utilizado para simular o comportamento de um poluente. As substâncias empregadas como traçador em cursos d'água naturais são altamente solúveis e os tipos mais comuns de traçadores são os fluorescentes e salinos.

A escolha da substância cloreto de sódio, NaCl, utilizada como traçador nesse trabalho, está relacionada às considerações de ordem prática e à satisfação de um conjunto de requerimentos que o traçador deve apresentar. Dentre suas vantagens, tem-se: solubilidade em água, presença natural quase nula, não tóxica para homens e animais, facilidade de armazenamento ou de quantificação, e também um custo muito baixo.

5.4.5 Método de injeção do traçador utilizado

O teste de campo foi realizado fazendo uso do método de injeção instantânea, na qual se injetou pontual e instantaneamente no eixo do canal, numa seção previamente selecionada, um volume conhecido de concentração também conhecida do traçador. Duas seções foram escolhidas a jusante de modo que, o processo de mistura tenha sido completado. Foram medidos os valores da condutividade em função do tempo fazendo uso de um condutivímetro portátil e de um cronômetro na seção de medição. A leitura foi feita durante todo o tempo de passagem da nuvem do traçador, até atingir o “branco”, isto é, até atingir a condutividade natural do rio.

Estes valores de condutividade foram convertidos em concentração através da aplicação da equação de calibração do condutivímetro, o que permitiu o levantamento da chamada curva de resposta, que é a representação cartesiana da curva completa da concentração do traçador em função do tempo durante a sua passagem pela seção escolhida. O procedimento de calibração do condutivímetro é descrito mais adiante.

5.4.6 Condutivímetro

A concentração do traçador salino artificialmente injetado em um curso d'água natural, a montante do ponto de amostragem, é determinada a partir das leituras de condutividade fornecidas por um condutivímetro.

Segundo DEVENS (2006), a condutividade de uma solução aquosa é a medida de sua habilidade em transmitir corrente elétrica, em função da temperatura. Para que ocorra o transporte de energia elétrica é condição fundamental que estejam presentes bons condutores, ou seja, partículas carregadas (íons).

A água possui um potencial de ionização baixo e, portanto, pequenas quantidades de soluções condutoras nela dissolvidas, como ácidos inorgânicos, bases e sais provocam um incremento na sua condutividade.

Neste trabalho, foi utilizado um condutivímetro, da marca mCA - 150P. Este aparelho possui uma sonda que se introduz no escoamento, podendo a leitura da condutividade ser feita em quatro escalas diferentes: 200, 20 e 2 mScm⁻¹ (milisiemens por centímetro) e 200 µScm⁻¹ (microsiemens por centímetro). Além disso, é dotado de um dispositivo que permite fazer a leitura da condutividade com a correção da temperatura. A Fig. 5.5 ilustra o condutivímetro

juntamente com a sua sonda de condutividade utilizado no teste de campo. Antes de utilizar o condutivímetro no teste de campo, foram feitas as suas calibrações em laboratório.



Figura 5.5 – Condutivímetro usado no teste de campo.

5.4.7 Calibração do condutivímetro

Como o método químico baseia-se em determinações da concentração de substância conservativa, a primeira parte das atividades esteve centrada na calibração do condutivímetro, aparelho que permite determinar a concentração de sais em solução através de correlação estabelecida com a condutividade elétrica. O processo de calibração consiste em obterem-se soluções a concentrações distintas e definidas, medindo-se a condutividade e definindo-se em seguida a possível correlação entre condutividade e concentração, que usualmente obedece uma função linear.

No presente estudo, é importante definir duas faixas de concentração, uma alta, da ordem de 10^3 mg l^{-1} , obtida na solução a ser utilizada no vaso de Mariotte, e outra baixa, da ordem de 10 mg l^{-1} , obtida após a diluição promovida pelo curso de água, cuja vazão deseja-se conhecer. O procedimento para obtenção das duas faixas de concentração consistiu em solubilizar-se sal de cozinha em água deionizada. As soluções assim obtidas foram progressivamente diluídas, de modo a ter-se uma faixa dentro da qual as concentrações

observadas no campo pudessem estar contidas. A Tabela 5.1 e a Fig. 5.6 apresentam os resultados.

Tabela 5.1 – Resultados da calibração

Altas concentrações - Valores calculados pela fórmula extraída da correlação		
Conductividade (10^{-6} S)	Concentração calculada (mg l^{-1})	Concentração real (mg l^{-1})
135000	347619,2	-
129000	332163,2	-
131000	337315,2	200000
117000	301251,2	160000
93000	239427,2	88000
78000	200787,2	60000
68000	175027,2	40000
Baixas concentrações - Valores calculados pela fórmula extraída da correlação		
Conductividade	Concentração calculada (mg l^{-1})	Concentração real (mg l^{-1})
436	211,32	210
161	78,03	84
113	54,77	53
90	43,62	42
45	21,81	21

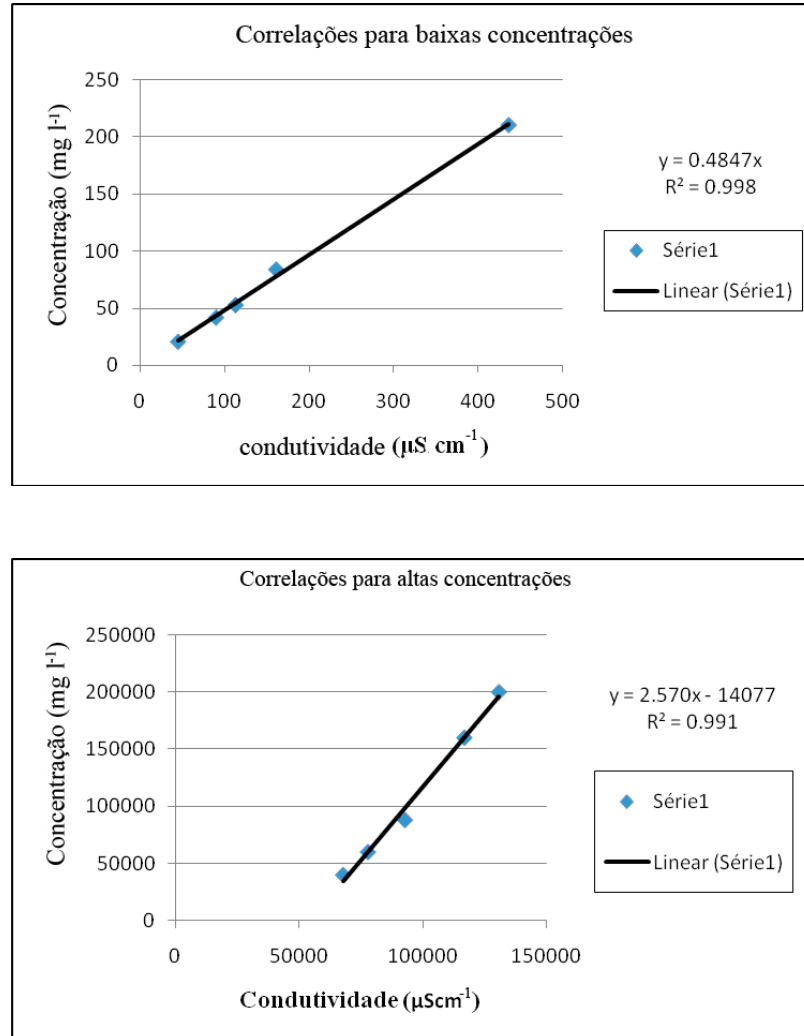


Figura 5.6 – Gráficos das correlações entre condutividade e concentração.

5.4.8 Concentrações conservativas

Alguns poluentes não são totalmente conservativos. Quando há incerteza de perda de traçador ou quando as características da deterioração de um poluente são desconhecidos, podemos determinar a massa recuperada, M_{rec} , numa posição a jusante do ponto de injeção usando a equação de continuidade dada por

$$M_{rec} = A_c \cdot Q \quad (5.4)$$

onde Q é a vazão do córrego e a A_c é a área sob a curva de resposta da concentração após a mistura completa na seção transversal obtida por

$$A_c = \int C dt \quad (5.5)$$

É importante que a área sob a curva A_c seja calculada utilizando amostras de uma curva determinada após uma mistura completa na seção transversal e uma boa maneira de verificar isso, é tirar amostras em diversos pontos transversais a fim de verificar se a mistura completa foi alcançada. Na prática, 100 por cento de mistura não será realizada, mas a A_c será mais confiável se valores médios forem utilizados, obtidos de diversas curvas de concentração a fim de garantir uma aproximação da homogeneidade da seção transversal. Deve-se igualmente notar que Q é a vazão no ponto da amostragem e com a vazão crescendo a jusante, a área sob a curva A_c torna-se-a menor.

Para o trabalho em estudo foi verificada uma concentração de sal existente no rio acrescentando massa ao sistema causando um aumento na área sob a curva. Por conseguinte, foi necessário corrigir esse “aumento” de massa descontando a massa trazida pelo rio. Com isso, a massa recuperada corrigida será calculada fazendo a diferença entre a massa recuperada e a massa trazida pelo rio, M_{rio} , ou seja,

$$M_{rec}^* = M_{rec} - M_{rio} \quad (5.6)$$

sendo $M_{rio} = C_R Q_R t_m$, sendo t_m o tempo de monitoramento da curva de resposta.

5.5 Descrição do experimento

Os experimentos foram realizados em São Pedro da Serra, 7º Distrito de Nova Friburgo (RJ), região que vem sendo afetada por um rápido processo de transformação espacial, social e econômica, com fortes impactos ambientais (LIMAVERDE FILHO et al., 2005). As medições foram feitas em um trecho do rio localizado na saída da vila, em frente à estrada do cemitério (Ponto 4, 22 19.155S, 42 19.897W).



Figura 5.7 – Vista parcial do trecho do rio São Pedro

O teste conduzido para a obtenção do coeficiente de dispersão no trecho descrito acima ocorreu no dia 26/01/09, quando, às 10:50:28 h, 2000 gramas de cloreto de sódio, diluídos em aproximadamente 15 litros de água em um balde, foram liberados instantaneamente em um ponto da seção de injeção, sobre a linha de corrente central do escoamento.

Em duas seções à jusante do local da injeção, na linha de corrente central do escoamento, foram colhidas 60 amostras de 200 ml da água misturada ao sal, a cada 15 segundos, para posterior análise em laboratório. O início da coleta das amostras da primeira seção foi programado para ser simultâneo ao momento da injeção da solução na seção de amostragem e posteriormente, a 1 minuto e 30 segundos, começaram as coletas na segunda seção. Nas operações de campo contou-se com a participação de 5 pessoas, distribuídas nos pontos de injeção e amostragem. Durante o teste, manteve-se apenas um operador na seção de injeção. Nas seções de amostragem atuaram quatro pessoas, duas em cada, na execução das tarefas de coleta manual das amostras e anotação dos tempos cronometrados em caderneta. Para o traçador salino, em cada ponto de amostragem, foram colhidas um total de 30 amostras.

Um resumo das características das seções de injeção do traçador, que serviram para o planejamento da injeção e para o estabelecimento do cronograma das amostragens, é apresentado na Tabela 5.2 que contém os valores médios da velocidade e profundidade, medidos na seção de injeção do traçador.

Tabela 5.2- Características da seção de injeção utilizada no planejamento do teste no Rio São Pedro.

Vazão $Q=UA$	Área A	Largura B	Profundidade $H=A/B$	Velocidade U	Declividade S
0,430 (m ³ /s)	1,05 (m ²)	2,4 (m)	0,43 (m)	0,41 (ms ⁻¹)	0,03 (mm ⁻¹)

Antes de dar início às injeções do sal, amostras foram colhidas no ponto de amostragem para a referência de fundo ("branco") do condutivímetro obtendo um valor médio da concentração existente de 15,5 mg/l. Após o teste, todas as amostras devidamente acondicionadas em seus respectivos frascos foram mantidas a temperatura *in natura* até o momento da leitura feito no condutivímetro. Os resultados das análises das amostras da água com sal são apresentados na Fig. 5.8, na forma da concentração do sal ao longo do tempo, nas seções de amostragem.

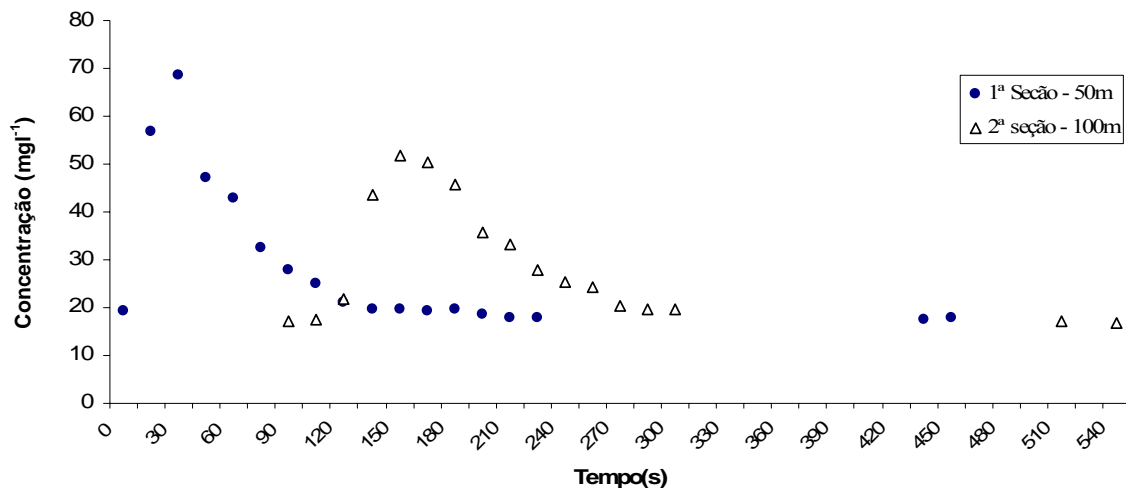


Figura 5.8 – Gráfico concentração *versus* tempo para as seções de amostragem

As seções de amostragem foram escolhidas além da zona advectiva, condição necessária para se poder aplicar o modelo unidimensional.

Para o cálculo do comprimento da zona advectiva na Eq. (2.30), foram utilizados os dados da Tabela 5.2 obtendo-se uma distância aproximada de 8 m para a mistura completa na seção transversal. Apesar da primeira seção ter sido escolhida a 50 m do ponto de injeção,

respeitando a distância exigida, a presença de um perfil gaussiano não foi identificado, como também uma diferença considerável nas concentrações referentes às amostras colhidas em três linhas de corrente do curso d'água. Com isso, através de análise das últimas amostras coletadas simultaneamente nas três linhas de corrente verificando a homogeneização na seção transversal, constatou-se para a primeira seção um desvio padrão de 2,44 para as amostras, enquanto que para a seção mais a jusante, este valor foi de 0,31 evidenciando a mistura incompleta do traçador maior para a primeira seção transversal, o que nos levou a considerar apenas os dados de amostras coletados na segunda seção para aplicação dos métodos de determinação do coeficiente de dispersão longitudinal.

6 RESULTADOS E DISCUSSÃO

6.1 Determinação da vazão pelo método das seções

Para o teste de campo, no local de injeção do constituinte, foram realizadas medições de profundidade e de velocidade de rotação do molinete em cada posição vertical da seção transversal do rio, conforme o esquema na Fig. 6.1

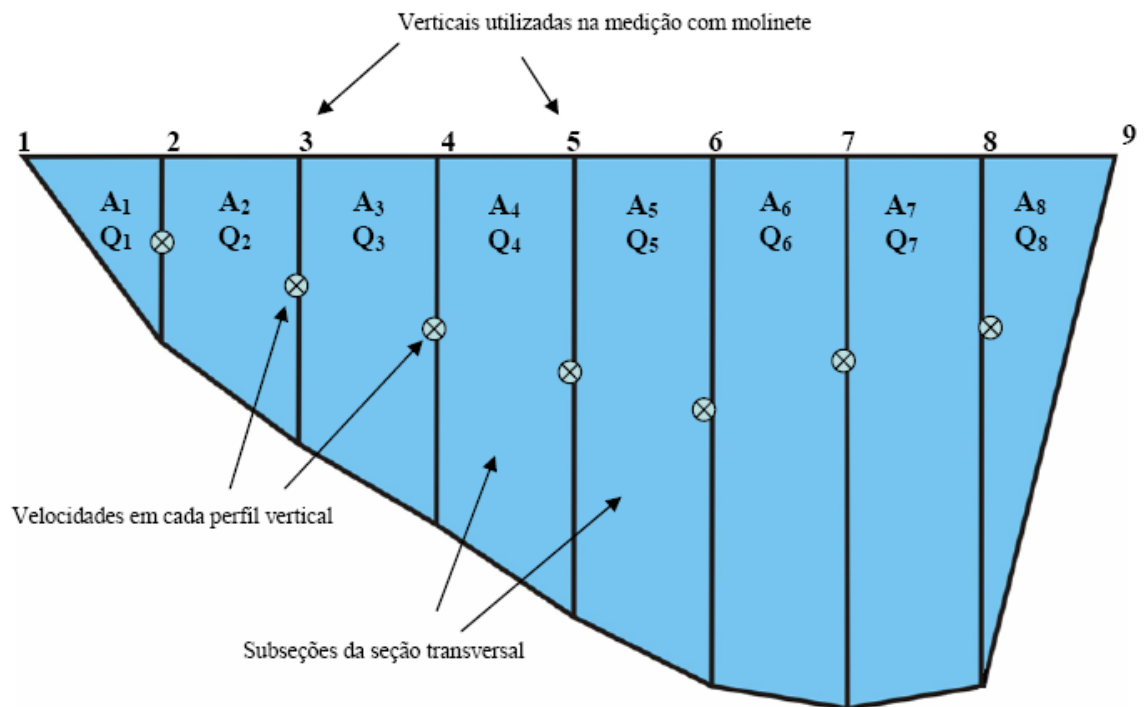


Figura 6.1 - Esquema da seção transversal do rio (modificado de SILVA, 2009)

Na Tabela 6.1 estão listados os valores medidos na seção transversal, tais como as as velocidades, as áreas e vazões d'água em cada subseção da seção transversal.

Tabela 6.1 – Valores das medições na seção transversal do rio (SILVA, 2009)

Seção	Velocidade (m s ⁻¹)	Área (m ²)	Vazão (m ³ s ⁻¹)
1	0	0,023	0
2	-0,009	0,060	-0,001
3	0,132	0,081	0,011
4	0,395	0,099	0,039

Tabela 6.1 – (continuação)

Seção	Velocidade (m s ⁻¹)	Área (m ²)	Vazão (m ³ s ⁻¹)
5	0,607	0,137	0,074
6	0,607	0,192	0,117
7	0,629	0,224	0,141
8	0,666	0,236	0,157
Área Total		1,052	
Vazão Total		0,538	

6.2 Determinação da vazão pelo método químico

Com o condutivímetro, foi medida a condutividade elétrica do rio antes e após o lançamento do efluente. Com esses valores, determinaram-se as concentrações de sal para cada caso, pois os valores de condutividade são correlacionados com as concentrações segundo uma relação de proporcionalidade, para baixas concentrações, conforme pode ser visto na Tabela 5.1.

Os valores das concentrações, Q_E e Q_R , calculada conforme a Eq. (5.3) para o trabalho de campo, são apresentados na Tabela 6.2.

Tabela 6.2 – Concentrações e vazões para o teste realizado no Rio São Pedro

Q_E (l s ⁻¹)	C_E (g l ⁻¹)	C_R (mg l ⁻¹)	C_f (mg l ⁻¹)	Q_R (l s ⁻¹)
0,0135	133	15,51	19,56	444,3

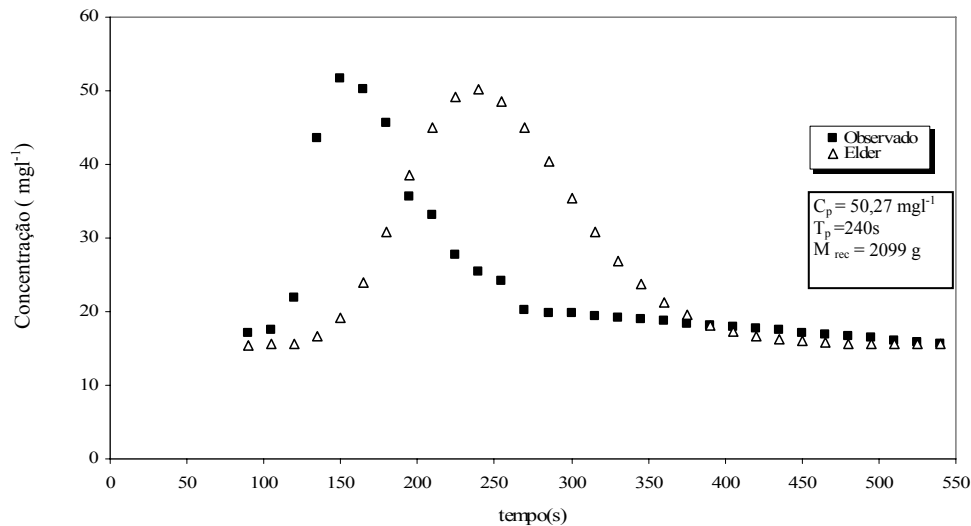
6.3 Obtenção do coeficiente de dispersão pelas fórmulas empíricas

Os resultados dos cálculos do coeficiente de dispersão empregando as fórmulas empíricas descritas na seção 3.2 são apresentados na Tabela 6.3.

Tabela 6.3 – Valores do coeficiente E_L estimados pelas formulas empíricas

Elder (Eq.3.3)	McQuivey e Keefe (Eq.3.4)	Fischer (Eq.3.5)	Liu (Eq.3.6)	Magazine (Eq.3.7)	Iwasa e Aya (Eq.3.8)	Seo e Cheong (Eq.3.9)	Koussis e Rodriguez- Mirasol (Eq.3.10)	Kasherfipour e Falconer (Eq.3.12)
0,99	0,31	0,63	0,92	56,45	4,25	3,15	2,98	2,39

A seguir são apresentados os gráficos comparando a evolução no tempo das concentrações observadas e as estimadas pela Eq. (2.29) na segunda seção e um resumo com os valores do tempo e concentrações máximos, como também as massas recuperadas para os valores do coeficiente de dispersão, determinados pelas fórmulas: (a) Elder; (b) Mcquivey e Keefe; (c) Fisher; (d) Liu; (e) Magazine; (f) Iwasa e Aya; (g) Seo e Cheong; (h) Koussis e Rodriguez-Mirassol; (i) Kashefipour e Falconer.

**Figura 6.2** – Gráficos comparando as concentrações observadas e estimadas pela fórmula de Elder na segunda seção de amostragem.

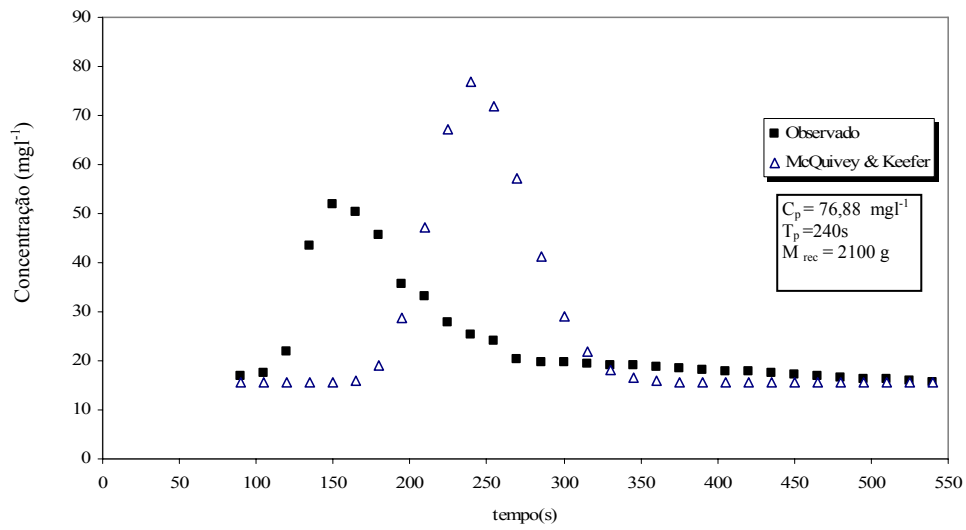


Figura 6.3 – Gráficos comparando as concentrações observadas e estimadas pela fórmula de McQuivey & Keefer na segunda seção de amostragem.

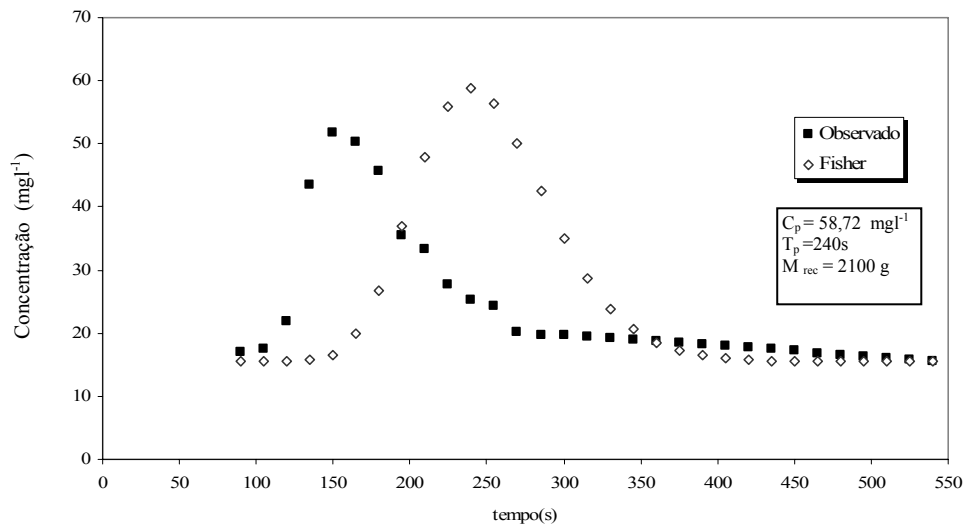


Figura 6.4 – Gráficos comparando as concentrações observadas e estimadas pela fórmula de Fischer na segunda seção de amostragem.

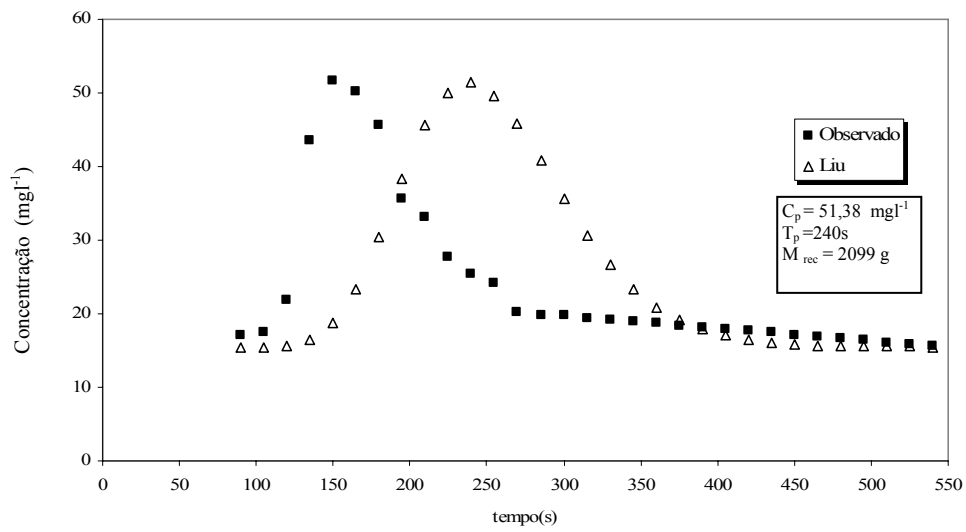


Figura 6.5 – Gráficos comparando as concentrações observadas e estimadas pela fórmula de Liu na segunda seção de amostragem.

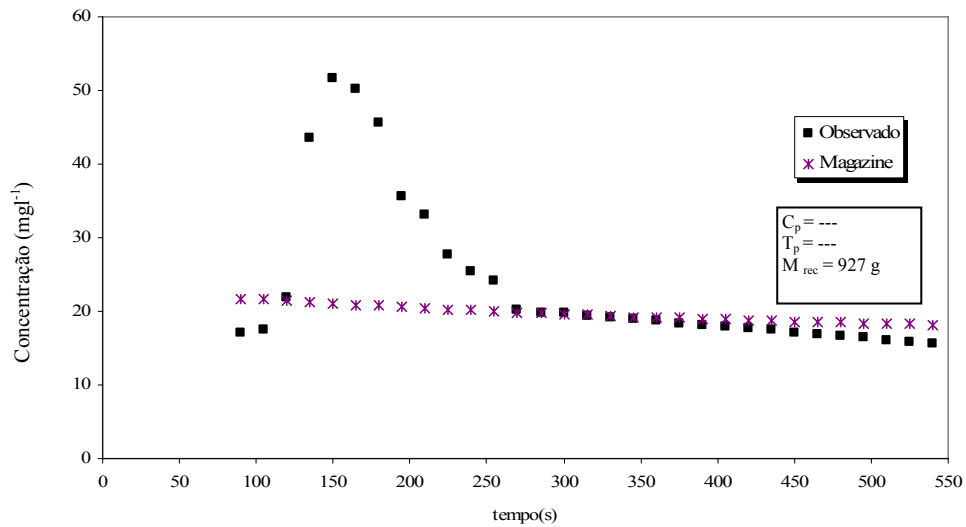


Figura 6.6 – Gráficos comparando as concentrações observadas e estimadas pela fórmula de Magazine na segunda seção de amostragem.

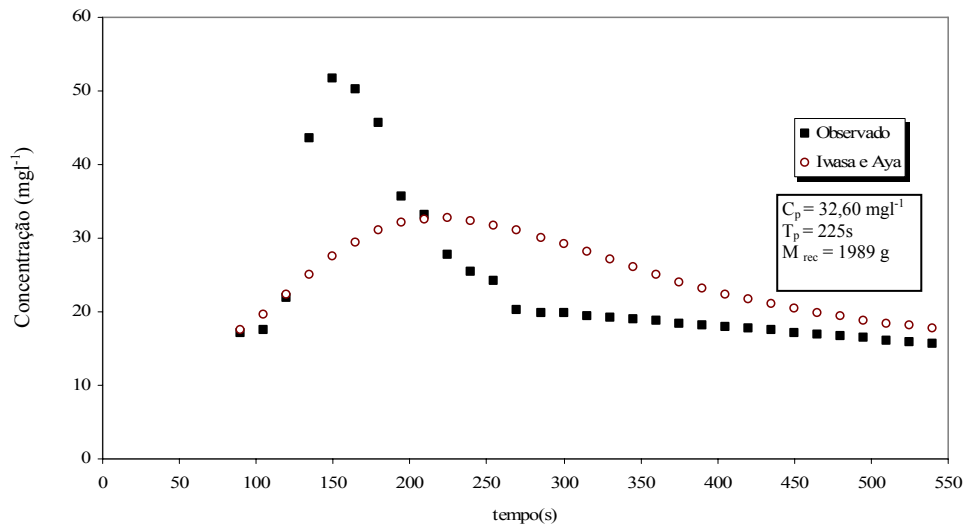


Figura 6.7 – Gráficos comparando as concentrações observadas e estimadas pela fórmula de Iwasa e Aya na segunda seção de amostragem.

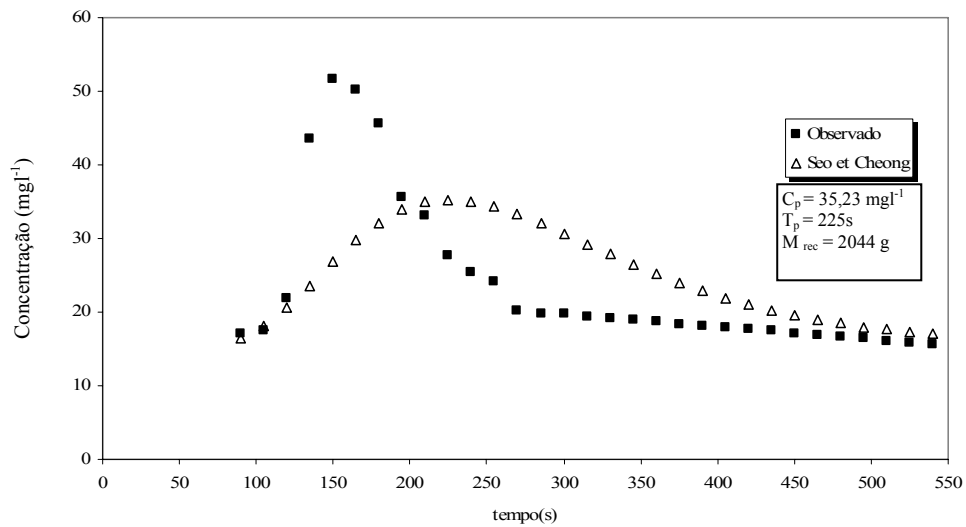


Figura 6.8 – Gráficos comparando as concentrações observadas e estimadas pela fórmula de Seo e Cheong na segunda seção de amostragem.

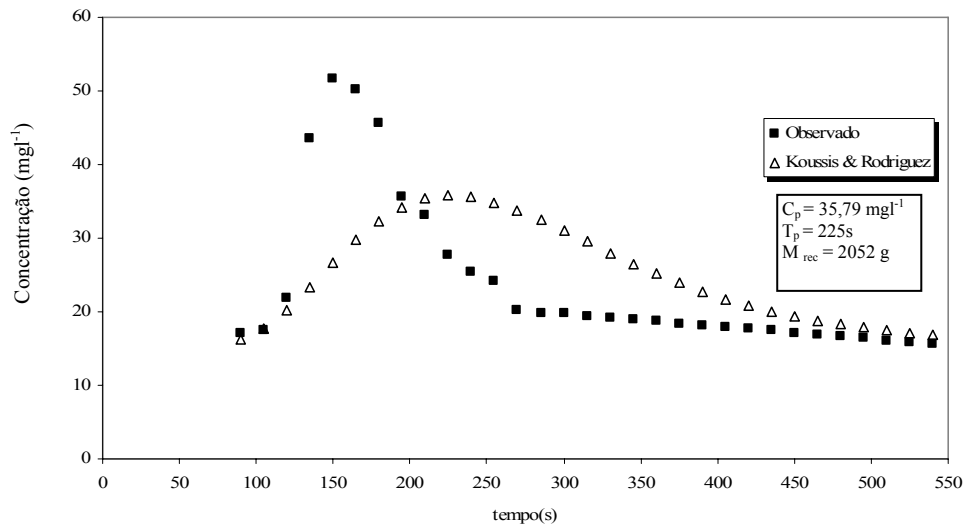


Figura 6.9 – Gráficos comparando as concentrações observadas e estimadas pela fórmula de Koussis e Rodriguez na segunda seção de amostragem.

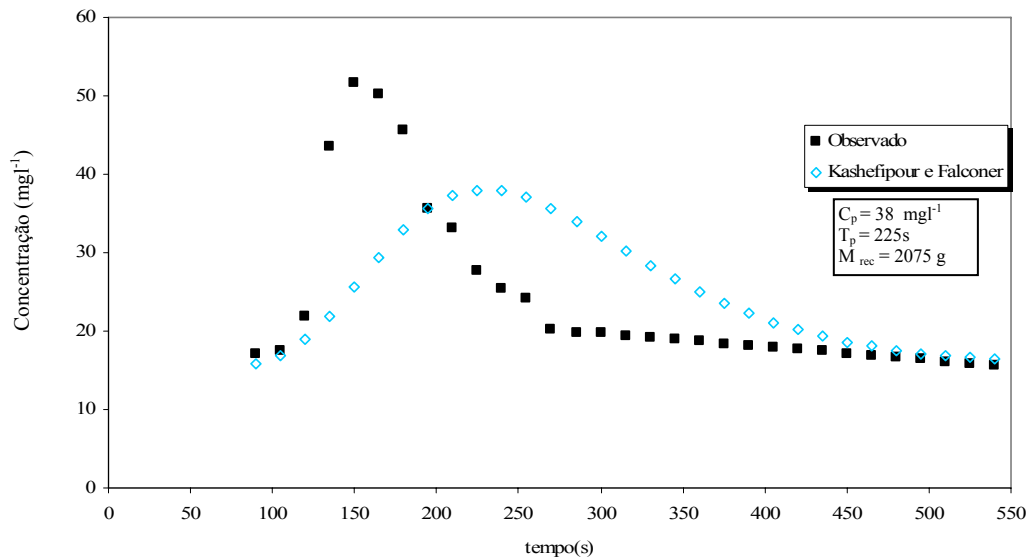


Figura 6.10 – Gráficos comparando as concentrações observadas e estimadas pela fórmula de Kashefipour e Falconer na segunda seção de amostragem.

As curvas de reposta das Figs. 6.2 à 6.10 foram obtidas considerando a velocidade e geometria da seção medidas no ponto de injeção. Como o rio estudado possui geometria muito complexa, tais dados não podem ser considerados representativos de todo o trecho

abordado, fato que seguramente se refletiu na grande discrepância (fase e pico) entre observação e simulação, conforme pode ser visto.

6.4 Obtenção do coeficiente de dispersão pelos métodos experimentais

6.4.1 Cálculo do coeficiente de dispersão pelo método de Chatwin

Na seção 3.1.1, foi descrito o procedimento gráfico de Chatwin para a obtenção de E_L . Pelo método de Chatwin, o valor deste coeficiente pode ser obtido no teste, uma vez que se dispõem da curva de concentração *versus* tempo para a seção de amostragem. Em termos da variável transformada de Chatwin $\left[t \ln(k/C\sqrt{t}) \right]^{0,5}$, o resultado é apresentado na forma gráfica da Fig. 6.11. Nesta figura, é traçado a linha reta que representa o modelo da advecção-dispersão, construídas a partir da análise de regressão linear.

Na aplicação do modelo, apenas os dados que definem o ramo de ascensão da curva de resposta são considerados, numa tentativa de eliminar os efeitos das caudas. Na aplicação da Eq. (3.1), o valor do coeficiente k foi obtido com base na concentração e tempo de pico, C_p e t_p .

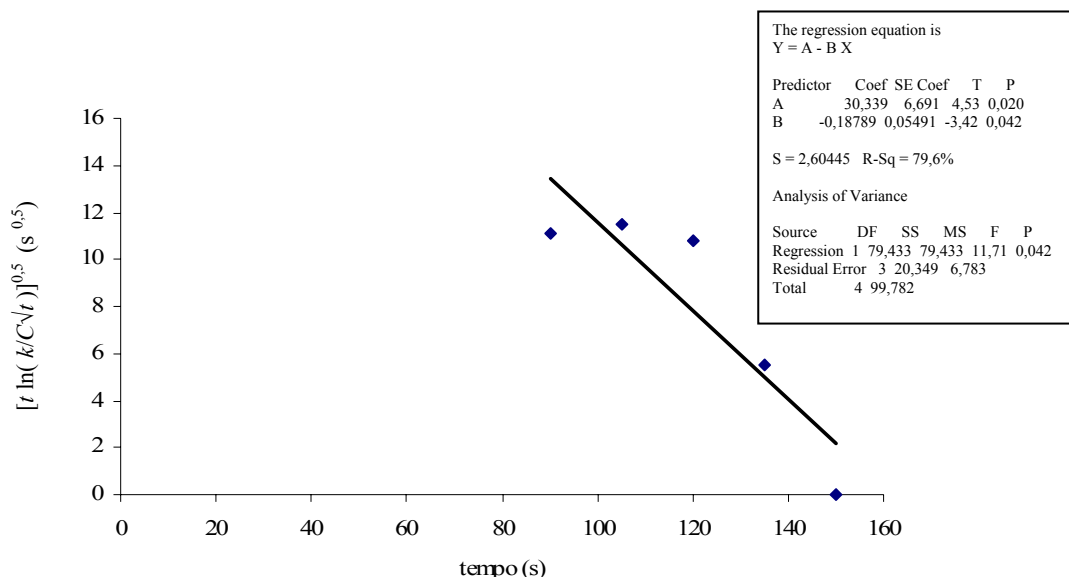


Figura 6.11 - Resultados em termos da variável transformada de Chatwin para a seção de monitoramento, e linhas de melhor ajuste conforme a Eq. (3.5).

O coeficiente de dispersão foi obtido utilizando o coeficiente linear da reta de regressão conforme a Fig. 6.11, escrevendo

$$\frac{0,5x}{\sqrt{E_L}} = 30,33 \quad (6.1)$$

Resolvendo a Eq. (6.1) tomando $x = 100$, que é a distância da seção de amostragem ao ponto de injeção, obtém-se $E_L = 2,71$. A curva de concentração *versus* tempo para o valor obtido pelo método de Chatwin utilizando os parâmetros geométricos e hidrodinâmicos, respectivamente área da seção transversal e velocidade determinados na seção de injeção, pode ser observada na Fig. 6.12.

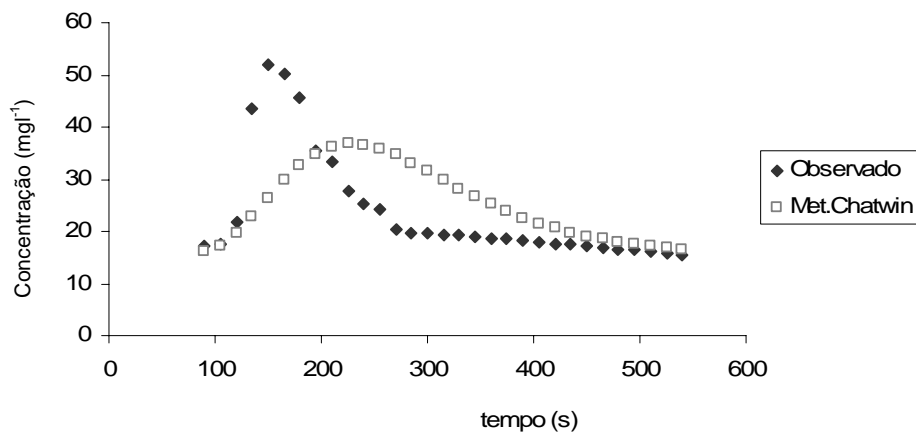


Figura 6.12 – Comparação entre as curvas de concentração *versus* tempo para os valores observados e os obtidos pelo método de Chatwin.

Uma aparente vantagem no método gráfico de Chatwin deve-se à obtenção de E_L em apenas uma estação de amostragem. Conseqüentemente isso requer menor custo devido à utilização de pouco material e equipe na realização de trabalhos de campo, conforme já enfatizado.

6.4.2 Cálculo do coeficiente de dispersão pelo método da concentração de pico

A obtenção de E_L por meio do método baseado na concentração de pico foi descrita na seção 3.1.2. DEVENS (2006) mostrou que a perda de massa de traçador tem influência na obtenção do coeficiente de dispersão, o que pode ser contornado a partir do procedimento

descrito na seção 5.4.8, onde há correção a partir do emprego da massa de traçador recuperada, dada pela Eq. (5.6), é adotada.

Como visto na seção 3.1.2, o coeficiente de dispersão é obtido da inclinação de uma reta que é traçada com base em dois únicos pontos (dois pares de valores de C_p e $1/\sqrt{x_p}$), o primeiro na seção mais a jusante e o segundo numa seção virtual, localizada no infinito. Como os valores C_p e $1/\sqrt{x_p}$ dessa seção são tornados nulos, podemos encontrar a declividade representada pelo coeficiente angular da reta apresentada no gráfico de C_p versus $1/\sqrt{x_p}$, onde a linha é traçada a partir da origem dos eixos coordenados, uma vez que a origem corresponde a uma seção idealizada, infinitamente distante da fonte onde a concentração é nula, conforme a Fig. 6.13.

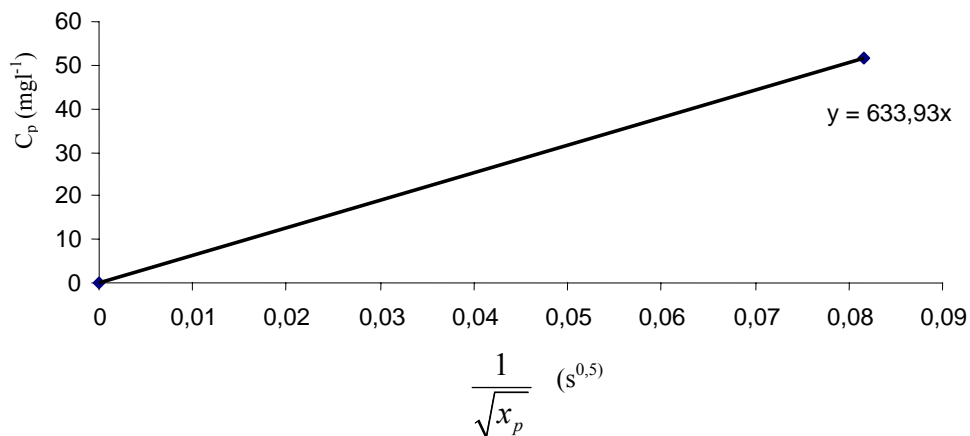


Figura 6.13- Concentração de pico versus $1/\sqrt{x_p}$

A inclinação da reta é usada na determinação do coeficiente de dispersão e utilizando a Eq. (3.2) escreve-se

$$\frac{M_{rec}}{A\sqrt{4\pi E_L/U}} = 633,93 \quad (6.2)$$

Substituindo os valores da massa recuperada, e os parâmetros registrados Tabela 5.2, obtém-se o valor do coeficiente $E_L = 1,75$. A curva de resposta obtida para o valor do coeficiente determinado pela Eq. (6.2) pode ser observada na Fig. 6.14.

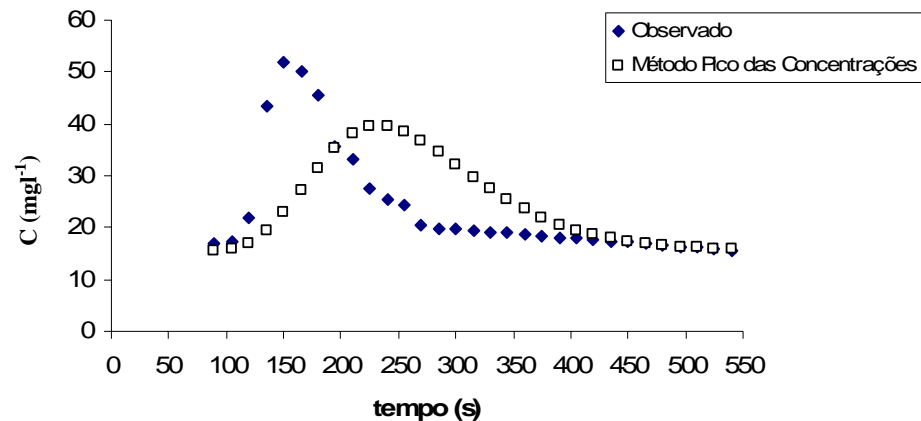


Figura 6.14 - Concentração *versus* tempo para o método do pico de concentração

Como pode ser observado na Fig. 6.14 há um retardo no tempo da concentração máxima assim como uma subestimação em relação aos valores observados ocasionando uma divergência na fase e pico, como ocorrido nas fórmulas empíricas.

6.5 Obtenção dos parâmetros da solução da equação de advecção-dispersão através do algoritmo de Levenberg-Marquardt

A aplicação dos parâmetros extraídos da seção de amostragem, tanto nas fórmulas empíricas quanto nos métodos experimentais, geraram curvas de resposta que apresentaram uma “defasagem” em relação ao pico de concentração, como pode ser visto nas representações gráficas das seções 6.3 e 6.4. Isso motivou a utilização de um método para problemas inversos, e optou-se pelo algoritmo de Levenberg-Marquardt (LM) descrito no capítulo 4, obtendo não só o coeficiente de dispersão, mas os parâmetros geométricos e hidrodinâmicos, área da seção transversal e velocidade, que representam os valores médios para esse trecho do rio em estudo. O algoritmo utilizado é apresentado no Apêndice 1.

Para verificar a eficácia de dois métodos de determinação da vazão na construção da curva de resposta do traçador, utilizou-se no algoritmo LM, a equação da continuidade $Q = UA$ substituindo o parâmetro A da Eq. (2.29) pela razão Q/U .

Para cada valor da vazão calculado pelos métodos químico e das seções, foram obtidos os valores do coeficiente de dispersão e velocidade média mostrados na Tabela 6.4.

Tabela 6.4 – Parâmetros determinados pelo algoritmo LM.

Parâmetro	Vazão	
	Químico (444 l s ⁻¹)	Seções (538 l s ⁻¹)
E_L (m ² s ⁻¹)	2,56	1,82
U (m s ⁻¹)	0,58	0,59
A (m ²)	0,76	0,9

As Figs. 6.15 e 6.16 mostram a representação gráfica das curvas, assim como um resumo com os valores de concentração máxima e massa recuperada.

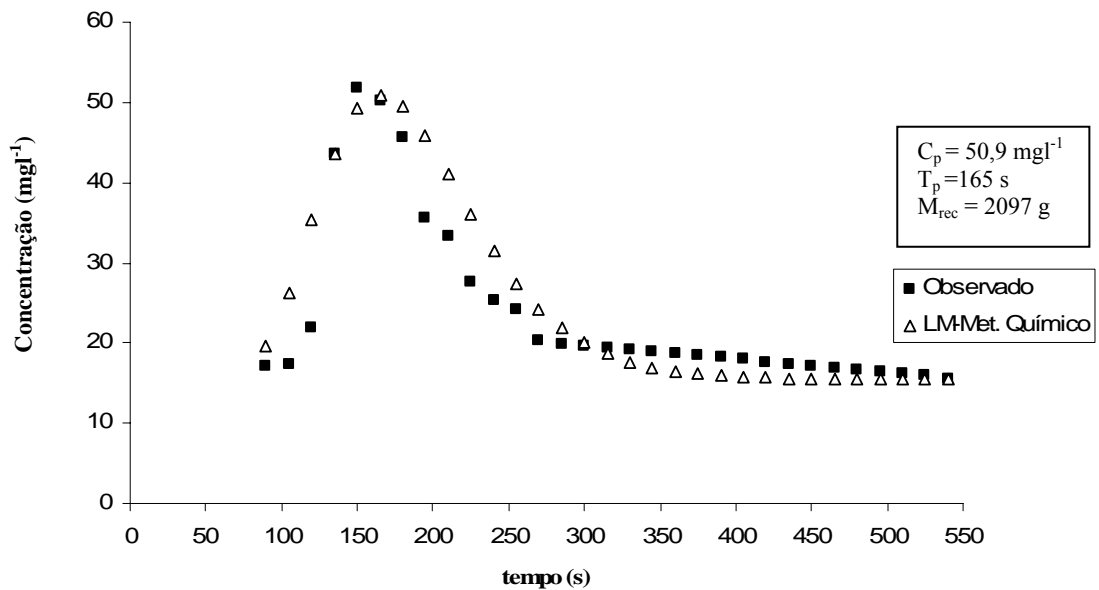


Figura 6.15 – Curvas de resposta referentes às concentrações medidas e estimadas pelo algoritmo LM utilizando a vazão determinada pelo método químico.

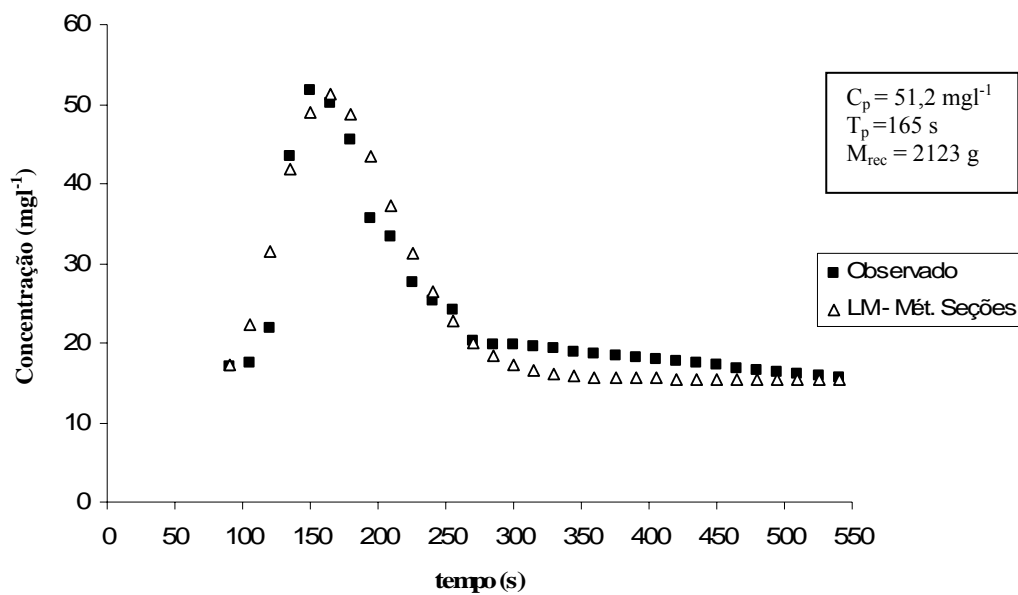


Figura 6.16 – Curvas de respostas referentes às concentrações medidas e estimadas pelo algoritmo LM utilizando a vazão determinada pelo método das seções.

6.6 Comparação das fórmulas empíricas

Nesta seção é feita a comparação entre as fórmulas empíricas, nos valores da massa recuperada e o valor da concentração e tempo máximos determinados por cada uma delas. Também foi calculada a variação percentual entre as medidas observadas e estimadas pelas fórmulas. Os valores da massa recuperada, concentração e tempo máximos são detalhados na Tabela 6.5. Foi omitida a análise dos parâmetros citados para a fórmula de Magazine, devido a uma subestimação da curva de resposta, conseqüência de um alto valor calculado por esse método.

É verificada uma superestimação em 5% entre a massa recuperada pelas fórmulas empíricas, expressa pela Eq. (5.6), e a massa do traçador injetado no curso d'água. Tal diferença pode ser oriunda da extrapolação feita para completar os dados de algumas medidas faltantes na curva de resposta.

Tabela 6.5 – Valores de alguns parâmetros obtidos pelas fórmulas empíricas

Fórmulas	Parâmetros avaliados				
	M _{rec} (g)	C _p (mg l ⁻¹)	t _p (s)	Variação (%)	
				C _p	t _p
Elder	2099	50,27	240	2,8	37,5
McQuivey e Keefer	2100	76,88	240	-48,5	37,5
Fisher	2100	58,72	240	-13,4	37,5
Liu	2099	51,38	240	0,7	37,5
Iwasa e Aya	1988	32,6	225	37	33,3
Seo e Cheong	2044	35,23	225	31,9	33,3
Koussis e Rodriguez- Mirasol	2052	35,79	225	30,8	33,3
Kasherfipour e Falconer	2085	38	225	26,5	33,3

A falta de um melhor ajuste entre a curva de resposta observada e as obtidas pelas fórmulas empíricas é consequência de um atraso nos tempos de concentração máxima, verificado nos gráficos da seção 6.3. Isso justifica uma análise comparando apenas os valores dos tempos e concentrações máximas estimados e os obtidos experimentalmente. Nas concentrações máximas houve uma variação nas previsões entre -48,5% e 37%, com a menor diferença igual a 0,7%, determinada com o uso da fórmula de Liu. Por outro lado, o pior ajuste é verificado na fórmula de McQuivey e Keefer que subestimou em 48% o valor da concentração máxima. Os tempos de concentração máximos foram superestimados em 33,3% e 37,5% para as fórmulas apresentadas, conforme pode ser visto na última coluna da Tabela 6.5.

Com isso, o uso das fórmulas empíricas seria viável numa situação de emergência em uma tomada de decisão a respeito de um impacto ambiental, por exemplo.

6.7 Utilização dos parâmetros geométricos e hidrodinâmicos obtidos pelo LM nos métodos de determinação experimental

Nesta seção é analisado o uso dos parâmetros hidrodinâmicos e geométricos obtidos pelo problema inverso com o uso do algoritmo LM, nos métodos de Chatwin e pico de concentração em substituição aos valores dos parâmetros determinados experimentalmente na seção de injeção, e que foram assumidos como valores médios do trecho do rio em estudo. Os valores encontrados são apresentados nas Tabelas 6.6 e 6.7. Por conseguinte, será comparada a eficácia dos métodos de determinação da vazão vistos na seção 5.4.3.

Para cada valor da vazão determinada pelos métodos apresentados na seção 5.4.3, foi utilizado o par de parâmetros (A,U) dos valores estimados pelo o algoritmo LM, que juntamente com o coeficiente de dispersão longitudinal determinado pelos dois métodos experimentais, possibilitaram a construção da curva de resposta utilizando a Eq. (2.29).

Tabela 6.6. – Parâmetros utilizados no método de Chatwin.

Vazão ($l\ s^{-1}$)	Parâmetros		
	E_L ($m^2\ s^{-1}$)	U ($m\ s^{-1}$)	A (m^2)
Método Químico ($444,3\ l\ s^{-1}$)	2,71	0,58	0,76
Método das Seções ($538\ l\ s^{-1}$)	2,71	0,59	0,9

Tabela 6.7. – Parâmetros utilizados no método do pico de concentração.

Vazão ($l\ s^{-1}$)	Parâmetros		
	E_L ($m^2\ s^{-1}$)	U ($m\ s^{-1}$)	A (m^2)
Método Químico ($444,3\ l\ s^{-1}$)	1,75	0,58	0,76
Método das Seções ($538\ l\ s^{-1}$)	1,75	0,59	0,9

Com os valores das Tabelas 6.6 e 6.7 é feito novas estimativas para os métodos de determinação experimental e a qualidade dos resultados pode ser visto em suas representações gráficas apresentadas vistas nas Figs. 6.17 à 6.20.

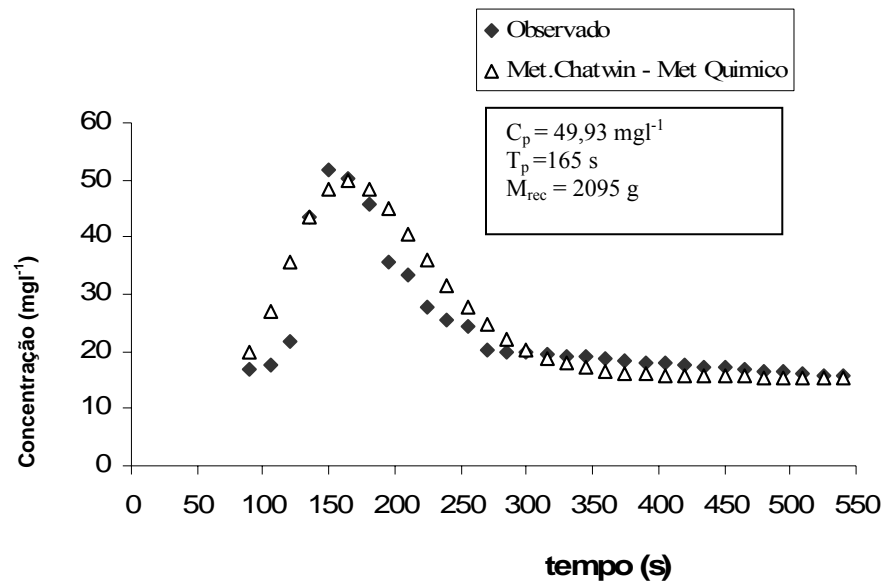


Figura 6.17 - Concentração *versus* tempo para o método de Chatwin utilizando a vazão determinada pelo método químico.

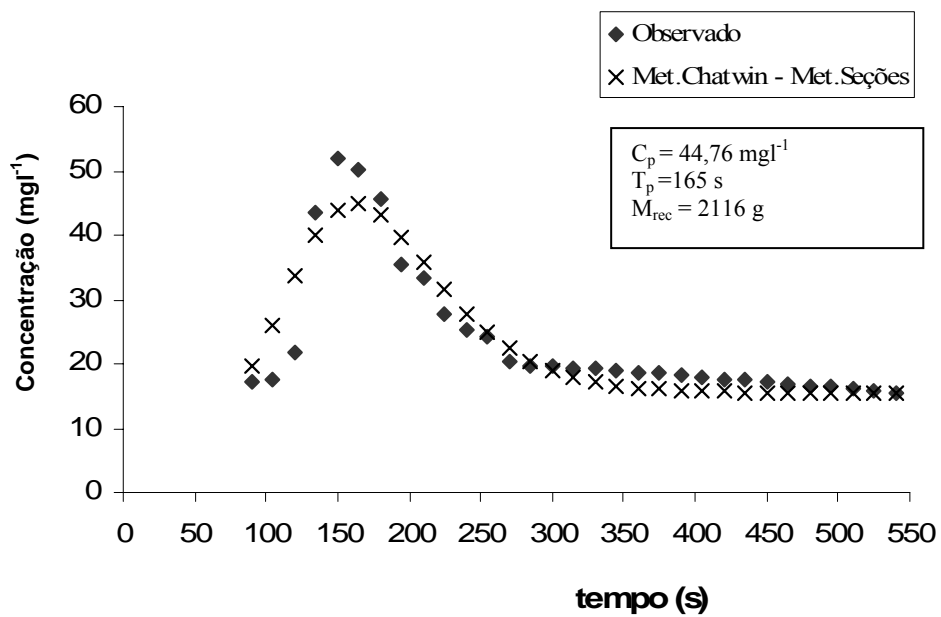


Figura 6.18 - Concentração *versus* tempo para o método de Chatwin utilizando a vazão determinada pelo método das seções.

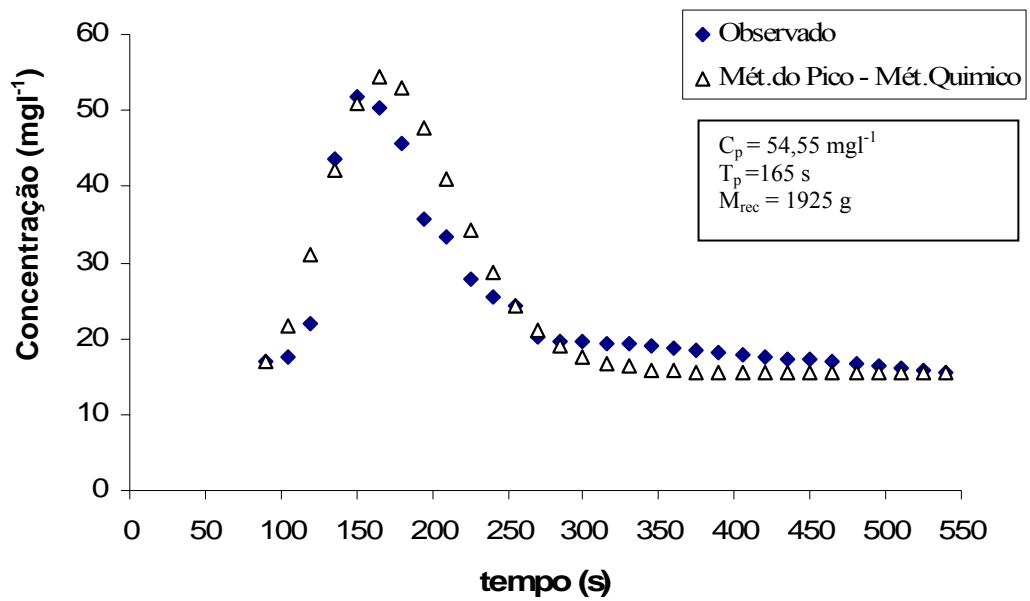


Figura 6.19 - Concentração *versus* tempo para o método do pico utilizando a vazão determinada pelo método químico.

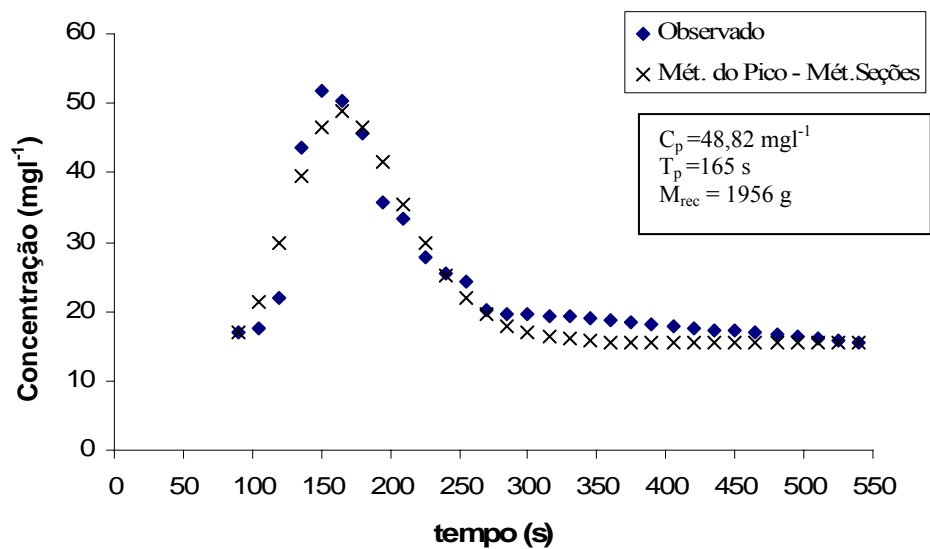


Figura 6.20 - Concentração *versus* tempo para o método do pico utilizando a vazão determinada pelo método seções.

Na Tabela 6.8, estão contidos os resultados em termos dos módulos do erro médio relativo (EMR), que é obtido da média dos módulos dos erros percentuais relativos calculados para a concentração de cada amostra e do resíduo médio quadrático (RMS – root mean square)

$$EMR = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left| \frac{C_{i(\text{método})} - C_{i(\text{obs})}}{C_{i(\text{obs})}} \times 100 \right| \quad (6.3)$$

$$RMS = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (C_{i(\text{método})} - C_{i(\text{obs})})^2}{N}} \quad (6.4)$$

Tabela 6.8 – Comparação entre os resultados das amostras de campo e os valores estimados pelos métodos experimentais utilizando as vazões do métodos químico e das seções.

Índice Estatístico	Método de Chatwin		Método do pico das concentrações	
	Químico (444 l s ⁻¹)	Seções (538 l s ⁻¹)	Químico (444 l s ⁻¹)	Seções (538 l s ⁻¹)
EMR (%)	14,09	11,98	12,42	10,73
RMS (%)	4,57	3,75	4,13	2,95

Os resultados apresentados na Tabela 6.8 mostram que os menores valores de EMR e RMS, respectivamente iguais a 10,73 e 2,95, correspondem ao método de pico adotando os parâmetros A e U recuperados pelo algoritmo LM, utilizando o método das seções, o que confirma a aproximação deste método com os valores observados no trabalho de campo. Por outro lado, constata-se que os maiores desvios são aqueles produzidos pelo método de Chatwin utilizando os parâmetros recuperados pelo algoritmo LM utilizando o método químico de determinação de vazão.

6.8 Comparação entre os valores obtidos pelo método de Levenberg-Marquardt

Nesta seção avaliamos os resultados obtidos pelo método de LM que buscou estimar os parâmetros A , E_L e U da solução da equação de advecção-difusão, Eq. (2.29). Inicialmente, foi feito o uso da equação da continuidade $Q = AU$, o que possibilitou a redução do número de parâmetros em um, com a substituição de A pela razão Q/U , onde Q é a vazão calculada pelos métodos químico e das seções, vistos na seção 5.4.3. A comparação da qualidade do ajustes

das curvas de resposta foram avaliadas usando as estatísticas EMR e RMS, definidas nas Eqs. (6.3) e (6.4), e seus resultados podem ser observados na Tabela 6.9.

Tabela 6.9 – Comparação entre os resultados das amostras de campo e os valores estimados pelo método LM utilizando as vazões dos métodos químico e das seções.

Estatística	Método LM	
	Químico (444 l s ⁻¹)	Seções (538 l s ⁻¹)
EMR(%)	14,06	11,22
RMS(%)	4,57	3,23

Os valores das concentrações máximas foram subestimados pelo método LM em 1,59% e 1,09%, respectivamente para a utilização da vazão obtida pelos métodos químicos e das seções. Por último, verifica-se um pequeno atraso nos tempos de concentrações máximas para ambos os métodos.

7 CONCLUSÕES

Um modelo de transporte, expresso pela equação de advecção-dispersão, permite determinar os perfis temporais de concentração em diferentes distâncias a jusante da fonte da injeção em um rio. Este modelo é escrito em função da quantidade de massa injetada e das características hidrodinâmicas e geométricas do curso de água como a velocidade e a área da seção do curso de água.

O modelo unidimensional, assumidas as hipóteses de aplicação, pode ser utilizado visando simular a dispersão de produtos químicos solúveis injetados instantaneamente, caracterizados por uma densidade equivalente à da água, e que não sofram nenhuma reação no meio em que sejam lançados.

Os cursos de água naturais frequentemente são caracterizados por uma sinuosidade, presença de zonas mortas, pela expansão ou de contração das áreas das seções transversais, por rugosidade variável, que influenciam o fenômeno de dispersão e que dificultam o uso das fórmulas empíricas de determinação do coeficiente de dispersão, que via de regra não contemplam tais características.

A consideração da maioria dos fenômenos que governam dispersão nos cursos de água naturais dificulta a modelagem em rios, aumentando o número de dados de entrada o que torna as simulações complexas, lentas e inadequadas para uma utilização em situações onde a simplicidade dos modelos e a rapidez das simulações são primordiais.

O comprimento de mistura, ou extensão da chamada zona advectiva, foi determinado utilizando os parâmetros geométricos e hidrodinâmicos extraídos da seção de injeção, assumidos constantes no trecho do rio considerado. Com isso, foram posicionadas as duas seções de amostragem, que foram mantidas a distâncias superiores à zona advectiva ou de mistura, empiricamente calculada em 8m, ficando, respectivamente a 50 e 100m do ponto de injeção do constituinte. Como o trecho do rio em estudo não apresenta uma regularidade em sua geometria, a estimação deste comprimento de mistura foi problemática, visto que, na primeira seção de amostragem foram verificados um perfil não-gaussiano da curva de resposta, assim como a presença de uma diferença de concentração na direção transversal, que foi verificada comparando-se concentrações observadas em três linhas de corrente do curso d'água. Tal fato levou à desconsideração da curva de resposta do traçador da primeira seção, para fins de utilização nos métodos de obtenção do coeficiente de dispersão.

Com as curvas de resposta do traçador obtidas com o uso das fórmulas empíricas, só foi possível comparar e avaliar as concentrações e os tempos máximos. Os melhores

resultados foram obtidos pelo uso das Fórmulas de Liu e Elder que superestimaram as concentrações máximas em 0,7% e 2,8% respectivamente. Em relação ao tempo da concentração máxima, por haver uma defasagem na curva de resposta construída a partir de tais valores, houve um atraso de 37,5%, em relação à concentração máxima registrada entre as amostras observadas. Tal defasagem também foi constatada nas curvas de resposta obtidas utilizando o coeficiente estabelecido com os métodos experimentais de determinação, quando fez-se uso dos parâmetros medidos na seção de injeção. A partir daí, houve uma tentativa em recuperar a curva observada, estimando-se esses parâmetros de modo que representassem mais satisfatoriamente os valores médios para o trecho considerado. Com esse intuito, adotou-se o algoritmo de Levenberg-Marquardt (LM) na busca dos parâmetros área da seção transversal, velocidade longitudinal e coeficiente de dispersão longitudinal médios. Assim, a aplicação dos parâmetros fornecidos pelo algoritmo LM junto aos valores do coeficiente de dispersão, determinados pelos métodos experimentais, possibilitou um ajuste satisfatório das curvas de concentração *versus* tempo aos dados observados.

A obtenção dos parâmetros pelo algoritmo LM foi feita utilizando uma vazão determinada por dois procedimentos descritos como métodos de determinação da vazão, o que forneceu um conjunto de três parâmetros estimados para cada método.

Entre os resultados obtidos pelo algoritmo LM destaca-se um melhor ajuste com a vazão calculada pelo método das seções com índices estatísticos, EMR e RMS, de 11,22% e 3,23% contra 14,06% e 4,57% para a vazão obtido pelo método químico.

Uma análise também foi feita comparando os resultados obtidos pelos métodos experimentais de determinação do coeficiente de dispersão quando os parâmetros geométricos são hidrodinâmicos fornecidos pelo algoritmo LM. Destaca-se uma maior precisão do método do pico das concentrações utilizando os parâmetros fornecidos pelo algoritmo LM com a vazão obtida pelo método das seções, com EMR e RMS de 10,73% e 2,75% respectivamente.

A consistência de todas as curvas simuladas, geradas a partir da adoção dos parâmetros estimados, foi avaliada comparando-se a massa efetivamente lançada com a massa total simulada. Essa última foi obtida do produto da integração numérica da curva simulada pela vazão do rio.

Com base nos resultados obtidos na simulação da curva de resposta do traçador, pode-se concluir que o código elaborado se mostrou eficaz para a estimação do coeficiente de dispersão bem como os parâmetros geométricos e hidrodinâmicos, assumidos desconhecidos para o trecho do avaliado. Baseado nisso, o modelo é considerado uma ferramenta útil para o monitoramento ambiental, no sentido de permitir um diagnóstico do processo de dispersão de

efluentes, auxiliando os órgãos de gestão ambiental na tomada de decisões na adoção de políticas saneadoras, que minimizem o processo de contaminação de corpos hídricos com as características aqui discutidas, e contribuam para a preservação do meio ambiente.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

AGÊNCIA NACIONAL DE ÁGUAS. *Disponibilidade e demandas de recursos hídricos no Brasil*. Distrito Federal, 2005. Disponível em: <<http://www.ana.gov.br>>. Acesso em: 26 nov. 2008.

BARBOSA Jr., A. R. *Uso de traçadores na determinação de parâmetros de qualidade em escoamentos naturais de água*. 1997. 187 f. Tese (Doutorado em Hidráulica e Saneamento) - Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 1997.

BARBOSA Jr., A. R.; SILVA, G. Q.; NEVES, B. V. B.; DEVENS, J. A. Métodos diretos de determinação do coeficiente de dispersão longitudinal em cursos d'água naturais. Parte 1 – fundamentos teóricos. *Revista Escola de Minas*, Minas Gerais, v. 58, n. 2, p. 139-145, jun. 2005.

CONSELHO NACIONAL DE MEIO AMBIENTE. *Resolução nº 01*. Dispõe sobre procedimentos relativos a Estudo de Impacto Ambiental. Disponível em <<http://www.mma.gov.br/port/conama/res/res86/res0186.html>>. Acesso em: 01 de agosto de 2008.

CONSELHO NACIONAL DE MEIO AMBIENTE. *Resolução nº 20*. [Define o enquadramento dos corpos de água segundo classes de usos preponderantes, padrões de qualidade e outras disposições relativas ao lançamento de poluentes em corpos de água]. Disponível em: <http://www.mma.gov.br/port/conama/res/res86/res2086.html>. Acesso em: 01 de agosto de 2008.

CONSELHO NACIONAL DE RECURSOS HÍDRICOS. Lei nº 9433 de 08 de janeiro de 1997. Institui a Política Nacional de Recursos Hídricos e cria o Conselho Nacional de Recursos Hídricos e o Sistema Nacional de Gerenciamento de Recursos Hídricos. Disponível em <http://www.cnrh.gov.br/sitio/index.php?option=com_content&view=article&id=16:lei-no-9433-de-8-de-janeiro-de-1997&catid=18:leis&Itemid=8>. Acesso em: 01 de agosto de 2008.

DEVENS, J.A. *Quantificação do coeficiente de dispersão longitudinal em pequenos cursos d'água naturais com o uso de traçador ambientalmente neutro*. 2006. 145 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Ambiental) - Universidade Federal de Ouro Preto, Ouro Preto, 2006.

FISCHER, H. B.; LIST, J. E.; Koh, C. R.; IMBERGER, J.; BROOKS, N. H. *Mixing in inland and coastal waters*. London: Academic Press, 1979.

HARRIS, J.; BALE, A. J.; BAYNE, B. L.; MANTOURA, R. F. C.; MORRIS, A. W. ; NELSON, L. A.; RADFORD, P. J.; UNCLES, R. J.; WESTON, S. A.; WIDDOWS, J. A. Preliminary model of the dispersal and biological effect of toxin in the Tamar estuary. *Ecological Modelling*, v. 22, p. 253-284, 1984.

HOLLEY, E.T. Difference modelling of stream pollution. *Journal Sanit. Engineering Division. Proc. ASCE*, v. 95, p. 968-972, 1969.

INSTITUTO BRASILEIRO DE GEOGRAFIA E ESTATÍSTICA. *Pesquisa Nacional de Saneamento Básico 2000*. Rio de Janeiro, 2006. Disponível em: <<http://www.sidra.ibge.gov.br/bda/pesquisas/pnsb/default.asp>>. Acesso em: 26 de novembro de 2008.

IWASA, Y.; AYA, S. Predicting longitudinal dispersion coefficient in open channel flows. In: INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON ENVIRONMENTAL HYDROLOGY. *Proceedings...* Hong Kong, 1991. p. 505-510.

JABBOUR, D. *Étude expérimentale et modélisation de la dispersion en champ lointain suite à un rejet accidentel d'un polluant miscible dans un cours d'eau. Application à la gestion de crise*. 2006. 246 f. Thèse (Doctorat dans Biosciences de l'Environnement) - Chimie et Santé, École Doctorale Sciences de l'Environnement, Université de Provence, Aix-Marseille I, 2006.

KASHEFIPOUR, S.; FALCONER, R. Longitudinal dispersion coefficients in natural channels. *Water Research*, v. 36, p.1596-1608, 2002.

KILPATRICK, F. A. Simulation of soluble waste transport and buildup in surface waters using tracers. In: U.S. DEPT. OF THE INTERIOR. U.S. GEOLOGICAL SURVEY. *Applications of hydraulics*. Denver: United States Government Printing Office, 1993. Techniques of Water-Resources Investigations of the United States Geological Survey, bk. 3, ch. A 20. V.3, chapter A9.

KOUSSIS, A. D.; RODRIGUEZ-MIRASOL, J. Hydraulic estimation of dispersion coefficient for streams. *Journal of Hydraulic Engineering ASCE*, v.124, p. 317-320, 1998.

LIMAVERDE FILHO, A.M.L. et al. Preservação dos mananciais do rio São Pedro: projeto interdisciplinar de educação ambiental. *Revista Rio de Janeiro*, n. 16-17, maio-dez. 2005.

LIU, H. Predicting dispersion coefficient of streams. *Journal of the Environmental Engineering Division*, v.101, p. 59-69, 1977.

MARÇAL, M. S.; LUZ, L. M. da. *Geomorfologia aplicada a classificação de unidade de paisagem na bacia do Rio Macaé - litoral Norte Fluminense*. In: SIMPÓSIO BRASILEIRO DE GEOGRAFIA FÍSICA APLICADA, 10., Rio de Janeiro. *Anais ...* Rio de Janeiro, 2003.

MCQUIVEY, R.S.; KEEFER, T. N. Simple method for predicting dispersion in streams. *Journal of the Environmental Engineering Division. Proceedings of the American Society of Civil Engineers*, v.100, n. 4, p. 997-1011, 1974.

MELLO, J. F. S. Mapa de sensibilidade ambiental da microbacia do rio São Pedro. In: JORNADA DE EDUCAÇÃO EM SENSORIAMENTO REMOTO NO ÂMBITO DO MERCOSUL, 4., São Leopoldo. *Anais...* São Leopoldo, 2004.

RIGO, D.; TEIXEIRA, E.C. Emprego de traçadores no projeto e otimização de

unidades de tratamento de água e efluentes. In: CONGRESSO BRASILEIRO DE ENGENHARIA SANITÁRIA E AMBIENTAL, 18., Salvador, 1995. *Anais...* Salvador, 1995.

RUTHERFORD, J. C. *River mixing*. Chichester: John Wiley & Sons, 1994. 347 p.

SILVA, Jéferson Tardoque. *Determinação da vazão de rios através do método químico: aplicação ao Alto Macaé*. 2009. Projeto final (Graduação em Engenharia Mecânica) – Instituto Politécnico, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Nova Friburgo, 2009.

SILVA NETO, A. J.; MOURA NETO, F. D. *Problemas Inversos: conceitos fundamentais e aplicações*. Rio de Janeiro: EdUERJ, 2005. 172 p.

SOCOLOFSKY, Scott. *Environmental Fluid mechanics 1: mass transfer and diffusion*.

Course Script (Textbook). Disponível em:

<http://www.ifh.uni-karlsruhe.de/lehre/envflu_I/Course_script/course_script.htm>. Acesso em: 01 de dezembro de 2008.

APÊNDICE

Neste apêndice é apresentado o código numérico utilizado para a estimação das concentrações da curva de resposta do traçador que busca minimizar o funcional representado pela Eq. (4.1) no capítulo 4. O código do algoritmo de Levenberg-Marquardt exposto na seção 4.2, foi executado no Matlab® resolvendo o problema inverso ali apresentado. O código do algoritmo foi desenvolvido construindo um arquivo com um programa principal e um arquivos para as funções que serão utilizadas pelo programa principal. Algumas destas funções foram elaboradas para cada vazão determinada pelos métodos apresentados na seção 5.4.3.

Códigos para o Matlab®

Código do programa principal para resolução do sistema linear representado pela Eq. (4.9)

```
%algoritmo levemberg-marquardt

u=sym('u');
d=sym('d');

m=2000;
x=100;

load t.txt
load cm.txt

v=[u,d];
dm=size(t);

R=resid(u,d)
J=jacobian(R,v);    % calculo da matriz jacobiana da função vetorial de resíduos R

u0=0.4;    % input da estimativa inicial para u
d0=0.4;    %input da estimativa inicial para d

k=0;
eps=10^(-9)    %tolerancia para critério de parada
E=[];          %Vetor criado para acumular os erros
V=[];          %Vetor para acumular as estimativas a cada iteração
erro1=10^5     % criado para entrada no loop while
erro2=10^5     % criado para entrada no loop while
L=4;           %lambda inicial
o=2;           %valor para calculo do lambda
```

```

while max(erro1,erro2) > eps %(erro1 > eps) && (erro2 > eps)

k
crit=0; %valor pra critério de calculo do lambda
zi=[u0;d0] %vetor de estimativas iniciais
V=[V;zi'];
jac=Ja(u0,d0); % matriz jacobiana avaliada no vetor zi de estimativas u e d

jt=transpose(jac) % matriz tranposta de J
F=transpose(res(zi)) % vetor coluna de residuos para as estim. u e d
Dg=diag(diag(jt*jac),0) % D=diag(Jt*J), matriz com elementos da digonal de JT*J

deltaZk=((jt*jac)+L*Dg)\-(jt*F) % passo na iteracao k

zk=[];
zk=zi + deltaZk %vetor de estimativa na iteração atual
whos jt jac Dg deltaZk zk

if sum(res(zk)) > sum(res(zi))
    l=L;
    l=l/o;
    deltaZk=((jt*jac)+l*Dg)\-(jt*F)
    zk1=zi + deltaZk

    if sum(res(zk1)) < sum(res(zi))
        L=l;
        zk=zk1;
        crit=1
    end;

    if crit~=1
        for i=1:5 % Teste para 5 valores de lambdas tais que L=Lo^i
            nL=L*o^i;
            deltaZki=((jt*jac)+nL*Dg)\-(jt*F);
            zki=zi + deltaZki

            if sum(res(zki)) < sum(res(zi))
                zk=zki;
                L=nL;
                break;
            end;

        end;
    end;
end;

end;
end;
end;

uk=zk(1,1);
dk=zk(2,1);
erro1=abs((uk-u0)/uk)

```

```

erro2=abs((dk-d0)/dk)
Ek=[erro1,erro2];      %vetor de erros relativo na iteração k
E=[E;Ek];             % vetor que contera os erros para cada iteração

if max(erro1,erro2) < eps
    break;
else
    k=k+1;
    u0=uk;
    d0=dk;

end

end

whos jt jac F deltaZk
E          % vetor de Erros em u e d
V          % vetor de estimativas u e d

k          % numeros da iterações realizadas com o critério de parada

plot(V(:,1),E(:,1),'ro')
hold on
plot(V(:,2),E(:,2),'b*')
title('Erros calculados para as estimativas u e d')
xlabel('Estimativas')
ylabel('Erros')
legend('Valores de u','Valores de d')
pause
close

```

Código do cálculo do cálculo da concentração utilizando a solução da equação de advecção-difusão (EAD).

```

% Função que calcula a concentração utilizando a solução da EAD.
function y=cc(t,u,m,a,d,x)
% cc é a concentracao calculada a partir da solução explicita da eq. de advecção-difusao
% unidimensional

y= 15.5+(m*exp(-((x-u*t)^2)/(4*d*t))/(a*sqrt(4*pi*d*t)));

```

Código da funções que, para cada vazão adotada, calcula os resíduos e a soma dos resíduos quadrados entre os valores estimados pela EAD e as concentrações medidas no teste de campo.

```

% Vazão adotada pelo método quimico
function y=res(v)

```

%função soma dos resíduos quadrados para as n leituras das concentrações, onde os argumentos

%são a velocidade e o coeficiente de dispersão. Retorna um vetor resíduo

% resid(v) onde v é um vetor

u=v(1,1);

d=v(2,1);

m=2000;

x=100;

a=0.444/u; %valor adotado para vazão pelo método químico

% a = 0.538/u % valor adotado para vazão pelo método das seções

load t.txt;

load cm.txt;

dm=size(t);

for i=1:dm(1) % criação de um vetor com os resíduos para n leituras

 %cc(t(i),u,m,a,d,x)

 y(i)=0.5*(cc(t(i),u,m,a,d,x)-cm(i))^2;

end;

function y=resid(u,d)

%função resíduo para as n leituras das concentrações, onde os argumentos

%são a velocidade e o coeficiente de dispersão. Retorna um vetor resíduo

m=2000;%gramas

x=100;

a=0.444/u; %valor adotado para vazão pelo método químico

% a = 0.538/u % valor adotado para vazão pelo método das seções

load cm.txt %leitura das conc. medidas

load t.txt %leitura dos tempos de registrados

dm=size(t);

for i=1:dm(1) % criação de um vetor com os resíduos para n leituras

 y(i)= cm(i)- cc(t(i),u,m,a,d,x);

end;

Conteúdo do arquivo t.txt com os valores de tempo registrados.

%tempos registrados na segunda seção

90

105

120

135
150
165
180
195
210
225
240
255
270
285
300

Conteúdo do arquivo cm.txt com os valores das concentrações observadas na segunda seção.

%concentrações medidas na segunda seção em mg/l ou m3/g

17.027511
17.4492
21.864817
43.501825
51.76596
50.21492
45.624811
35.567286
33.226185
27.690911
25.383739
24.201071
20.294389
19.736984
19.717596

Livros Grátis

(<http://www.livrosgratis.com.br>)

Milhares de Livros para Download:

[Baixar livros de Administração](#)

[Baixar livros de Agronomia](#)

[Baixar livros de Arquitetura](#)

[Baixar livros de Artes](#)

[Baixar livros de Astronomia](#)

[Baixar livros de Biologia Geral](#)

[Baixar livros de Ciência da Computação](#)

[Baixar livros de Ciência da Informação](#)

[Baixar livros de Ciência Política](#)

[Baixar livros de Ciências da Saúde](#)

[Baixar livros de Comunicação](#)

[Baixar livros do Conselho Nacional de Educação - CNE](#)

[Baixar livros de Defesa civil](#)

[Baixar livros de Direito](#)

[Baixar livros de Direitos humanos](#)

[Baixar livros de Economia](#)

[Baixar livros de Economia Doméstica](#)

[Baixar livros de Educação](#)

[Baixar livros de Educação - Trânsito](#)

[Baixar livros de Educação Física](#)

[Baixar livros de Engenharia Aeroespacial](#)

[Baixar livros de Farmácia](#)

[Baixar livros de Filosofia](#)

[Baixar livros de Física](#)

[Baixar livros de Geociências](#)

[Baixar livros de Geografia](#)

[Baixar livros de História](#)

[Baixar livros de Línguas](#)

[Baixar livros de Literatura](#)
[Baixar livros de Literatura de Cordel](#)
[Baixar livros de Literatura Infantil](#)
[Baixar livros de Matemática](#)
[Baixar livros de Medicina](#)
[Baixar livros de Medicina Veterinária](#)
[Baixar livros de Meio Ambiente](#)
[Baixar livros de Meteorologia](#)
[Baixar Monografias e TCC](#)
[Baixar livros Multidisciplinar](#)
[Baixar livros de Música](#)
[Baixar livros de Psicologia](#)
[Baixar livros de Química](#)
[Baixar livros de Saúde Coletiva](#)
[Baixar livros de Serviço Social](#)
[Baixar livros de Sociologia](#)
[Baixar livros de Teologia](#)
[Baixar livros de Trabalho](#)
[Baixar livros de Turismo](#)